



TITLE:

心放射図のパラメータ推定に関する基礎的研究(Dissertation_全文)

AUTHOR(S):

湊, 小太郎

CITATION:

湊, 小太郎. 心放射図のパラメータ推定に関する基礎的研究. 京都大学, 1980, 工学博士


ISSUE DATE:

1980-07-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k2423>


RIGHT:



心放射図のパラメータ推定 に関する基礎的研究

1979

湊 小太郎



心放射図のパラメータ推定 に関する基礎的研究

1979

湊 小太郎

DOC
1980
2
電気系

目 次

第1章 序 論

1.1 はじめに	1
1.2 本論文の概要	3

第2章 関心領域の自動設定

2.1 はじめに	5
2.2 関心領域の自動設定	7
2.3 心室の分離	11
2.4 ま と め	17

第3章 心放射図のパラメータ推定

3.1 はじめに	18
3.2 心放射図とその数学モデル	18
3.2.1 心放射図の計測	18
3.2.2 RI 輸送過程の数学モデル	18
3.3 シミュレーションの自動化	22
3.3.1 パラメータ推定問題の設定	22
3.3.2 周波数窓法	23
3.3.3 数学モデルの性質とパラメータ感度解析	24
3.3.4 パラメータ推定の手順	26
3.3.5 処 理 例	28
3.4 ま と め	30

第4章 パラメータ推定の一意性と安定度

4.1 はじめに	32
4.2 パラメータ推定問題の幾何学的解釈と一意性に関する条件	34

4.3	パラメータ推定値の安定度	41
4.4	ま と め	43
第5章 数値逆ラプラス変換の誤差に関する1考察		
5.1	はじめに	44
5.2	FFT を用いた逆変換の数値計算法	45
5.3	誤差解析	46
5.3.1	積分誤差	46
5.3.2	台形誤差	49
5.3.3	逆変換全体の誤差	50
5.4	積分路の影響	51
5.5	考 察	52
5.6	ま と め	52
第6章 GMDH の収束に関する2, 3の性質		
6.1	はじめに	53
6.2	簡単化したGMDH	53
6.2.1	簡単化したGMDH のアルゴリズム	54
6.3	アルゴリズムの性質	56
6.4	考 察	60
6.5	ま と め	61
第7章 結 論		
謝 辞		64
参 考 文 献		65

第1章 序 論

1.1 はじめに

ラジオアイソトープ (radioisotope, RI) や色素を利用して物質の輸送や拡散・吸収過程を追跡するいわゆるトレーサ法 (tracer method) は、医用生体工学等で古くからよく用いられている。

トレーサ法で得られたデータの数学的解析法にコンパートメントアナリシス (compartmental analysis) がある。コンパートメントアナリシスは、生体システムの物質やエネルギーの輸送現象を大局的に取扱うための便利な解析法であり、システム・制御工学的見地からの医用生体工学への1つのアプローチとすることができる。

生体のある器官や領域が、物質の輸送現象に関して他と区別され、1つのまとまりとみることができれば、これは1つのコンパートメントである。コンパートメント中では物質は瞬時に完全に混合されると仮定すれば、一連のコンパートメントから成るコンパートメントシステムにおける物質の動的なふるまいは、集中定数線形微分方程式系で表現される。言い換えれば、生体機能の数学モデルが構成できることになる。

モデルを決定する問題はシステム同定の問題と呼ばれる。さらに、対象となる生体システムの構造がある程度判明している場合には、同定問題はいわゆるパラメータ推定問題に帰着される。もしもモデルが適当に構成され、全体の動特性が正確に表現されていれば、モデルのパラメータはこれに対応する生理的事実の存在を示唆することになる。この観点から、モデルはできるかぎり簡単で見通しがよく、かつそのパラメータが生理的事実を適確に代表するものであることが望ましい。

システムの同定は、一般にモデルのパラメータあるいは次数等を変化させて、実システムの観測データとモデルの対応する出力を比較し、適合させることによって実現される。この過程は曲線あてはめ (curve fitting) と呼ばれる。

一旦システムが同定されると、次は適当な入力やパラメータ値に対するモデルの出力を求めて、その性質を調べることになる。これは同様のことを実システムについて行なうよりも一般に安価で再現性に富み、危険の少ない条件のもとで短時間にもとのシステムに対する理解を深めることができる重要な過程であり、シミュレーションと総称される。

このようなコンパートメントアナリシスの歴史は、古く 1950 年前後にまで遡る (Jacquez, 1972; Sheppard, 1962) が、可同定性 (Bellman, 1970; Cobelli, 1976a, 1978), 可観測性 (Cobelli, 1976b) や最小実現問題 (Maeda, 1976, 1978) 等がシステム理論的に研究され始めたのは比較的最近のことである。

コンパートメントアナリシスの実用的な適用例の 1 つに、心放射図 (radiocardiogram, RCG) を対象にしたヒトの心臓循環系の解析がある。ここに心放射図とは、ヒトの血管中に RI を 1 回急速注入し、それが心臓部を通過する過程をシンチレーション検出器 (scintillation detector) により体外計測したものである。1958 年に MacIntyre らはトレーサとして ^{131}I 標識ヒト血清アルブミン (RIHSA) を用い、心放射図と体内平衡時希釈量実測値から、1 分間の心拍出量を計算した。それ以来、心放射図は簡単な心拍出量の測定法として臨床的に広く用いられている。

1967 年に桑原、平川らは、肘静脈から RI を注入した場合の再循環を考慮した循環系の RI 輸送過程を示すコンパートメントモデルを作成し、アナログ計算機を用いた曲線あてはめ法によってモデルのパラメータを推定した。その結果、心拍出量だけでなく、従来は明らかにされなかった心機能を表わすいくつかの値、すなわち右心房と右心室を含む右心系、肺循環系、左心房と左心室を含む左心系および体循環系の各平均通過時間、心臓中隔欠損がある場合の左心から右心への短絡率等が得られるようになった。この心放射図解析法は現在臨床検査に供されており、そこでは高速アナログ計算機をシミュレータに使用し、人手による曲線あてはめによってパラメータの推定がなされている。

このモデルは通常のコンパートメントモデルと若干異なり、基本的には 4 つのコンパートメントと 2 つの輸送おくれを示すむだ時間とから構成されている。またモデルのパラメータが各々対応する生理的意味を持っていることも特徴的である。しかしながら計測系の利得等の付加的なものを含めると 11 個ものパラメータを推定しなければならず、曲線あてはめの操作手順と技術にある程度の熟練が必要とされる。さらに高速アナログ計算機の手入も必ずしも容易ではない。

一方、近年シンチレーションカメラの出現と、ミニコンピュータを中核とする核医学データ処理システムの普及に伴って、心臓部の RI 輸送現象を表わす 2 次元画像の時系列である RI アンギオカーディオグラム (radioisotope angiocardigram) のデジタル計算機処理が急務となっている (Hachimura, 1979; Preston, 1976)。

本研究は伝統的なコンパートメントアナリシス、すなわち大局的な RI 輸送過程の動的解析の観点から、シンチレーションカメラの計測データについての一貫した情報処理を目標とした

ものである。具体的には、RI アンギオカーディオグラムからの心放射図の作成とそのパラメータ推定による自動解析のための基礎的手法の開発が目的である。

1.2 本論文の概要

本論文は2つの部分から構成されている。すなわち、前半の第2章と第3章ではミニコンピュータシステムを用いたシンチレーションカメラのデータ処理と心放射図の自動解析についての具体的な処理手法を述べ、後半の第4,5および6章では心放射図のパラメータ推定過程に現われるいくつかのシステム・制御工学上の基礎的問題について理論的に考察している。

つぎに各章の内容を簡単に述べる。

第2章では、シンチレーションカメラの一種であるオートフルオロスコープ (autofluoroscope) で計測された RI アンギオカーディオグラムを対象として、心臓循環系各部の関心領域 (region of interest, ROI) を自動的に設定するための1手法を示す。すなわち、 14×21 の画素から成る RI 画像上で、右心の入力部、右心部、肺部および左心部に対応する領域を各画素のガンマ線計数率曲線 (time-radioactivity curve) の極大値到達時刻を手がかりにして客観的に決定し、心放射図を得る。さらに周波数分析によって心室部分を分離する手法を述べる。

第3章は心放射図の自動解析を扱う。まず循環系における RI 輸送過程の数学モデルについて述べ、このモデルのパラメータ推定手法を開発する。その際、モデルに対するパラメータの影響を調べるためにパラメータ感度解析を導入し、また推定に要する計算機処理時間を短縮するために、周波数窓法 (window method in frequency domain) を提案する。さらにパラメータ推定の出発値決定に発見的なシステム同定手法の1つである GMDH (group method of data handling) を適用する。そして若干の処理例を示し、ミニコンピュータを利用したこの自動解析法が従来のアナログ計算機によるものと比較して、信頼性と処理時間について十分臨床的実用に耐えるものであることを明らかにする。

第4章では、パラメータ推定における一意性と安定度についてテンソル解析を適用して幾何学的に論じる。すなわち実システムの観測データとモデル出力の重み付き残差2乗和を評価関数とするパラメータ推定法において、データにかかわらずパラメータを一意的に決定できるための条件を明らかにし、さらに安定度の概念を導入して、推定パラメータ値がデータの変動に対応してどのようにふるまうかを検討する。

第5章では、むだ時間を含む線形微分方程式の便利な数値計算法の1つである FFT を利用した数値逆ラプラス変換法の誤差について検討する。すなわち、この計算法の誤差解析の端緒

として，簡単な 1 次おくれ系を例にとり数値逆ラプラス変換後の時間領域における誤差の様子を明らかにする。

第 6 章では，GMDH の収束性に関する若干の性質を導き，その適用上留意すべき点を指摘する。

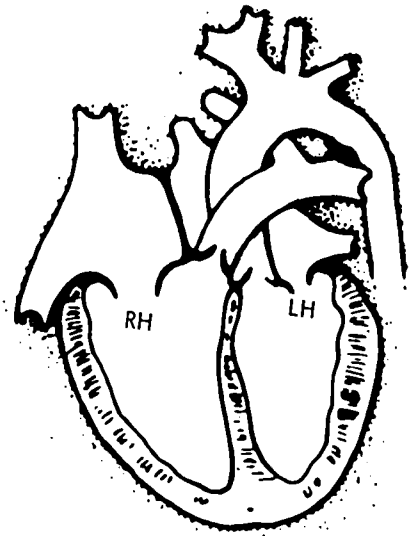
最後に第 7 章では本研究を総括し結論を述べる。

第2章 関心領域の自動設定

2.1 はじめに

ガンマ線を出す放射性同位元素 (radioisotope, RI) を血管中に投与し, その時間的および位置的推移を心臓部を覆う前胸部体表上で, シンチレーションカメラによって計測した RI 画像を RI アンギオカーディオグラム (RI angiocardigram) という。RI が血液と瞬時に完全混合すると仮定すれば, これによって中心循環系の血液の流れを観察することができる。参考までにヒトの中心循環系を模式的に示せば, 第 2.1 図のようになる。すなわち, 静脈から右心房に入った血液は右心室から肺循環系へ送られ, 酸素を供給された後左心房に至り, さらに左心室をへて全身へと送出される。便宜上, 今後この右心房と右心室を併せて右心部, 左心房と左心室を併せて左心部と呼ぶことにする。

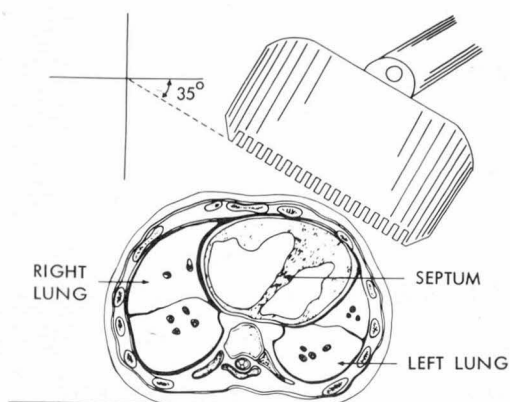
RI アンギオカーディオグラムの測定法を第 2.2 図に示す。図はカメラのディテクタヘッドを前胸部斜左前方に設置した, いわゆる左前斜位 (left anterior oblique, LAO) の場合の被検者とカメラの位置関係を表わしている。また斜右前に設置した場合は右前斜位 (right anterior oblique, RAO) と呼ばれる。第 2.3 図はシンチレーションカメラの一種であるオートフルオロスコープ (autofluoroscope) によって得られた RI 画像の 1 例である。画像は RAO



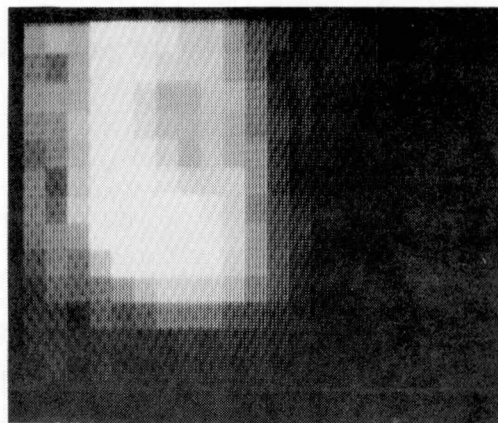
第 2.1 図 中心循環系の模式図 (RH: 右心部, LH: 左心部)

30° に置いたカメラで, 主に右心部に RI が存在する時間内のガンマ線計数を蓄積したものであり, 1 画素が約 1 cm² の大きさを有する 14 × 21 個の画素から構成されている。

RI をトレーサ (tracer) として用いる循環系の機能検査では, 伝統的に心臓部あるいは肺部等の臓器を 1 つのコンパートメントとみなし, その RI 動態を示す計数率曲線 (time-radioactivity curve) を解析して血液の平均通過時間等の循環動態を評価することがおこなわれる。



第 2.2 図 RI アンギオカーディオグラムの測定法



第 2.3 図 オートフルオロスコープによる RI 画像の 1 例

たとえば心放射図 (radiocardiogram) は右心部と左心部を含む心臓部分全体に注目して、この部分から計測されるガンマ線計数率の時間的変化、いわゆる希釈曲線 (wash out curve) をグラフにしたものである。このように RI アンギオカーディオグラムから各臓器の希釈曲線を得るためには、当面知りたい臓器をとらえている RI 画像上の領域を関心領域 (region of interest, ROI) として決定しなければならない。従来この設定はほとんど医師の手によってなされている。これにはある程度の熟練と労力を要し、また客観性や再現性の点でも問題があった。

本章ではオートフルオロスコープで得られた RI アンギオカーディオグラムを対象に、右心入力部、右心部、肺部および左心部の関心領域を自動的に設定することによって、医師の負担を軽減するとともに客観性のある希釈曲線を得るための方法について検討する。

関心領域設定の自動化については、すでにクラスタ分析を適用した長沢ら (1977, 1978) の研究があり、これは各画素の計数率曲線を用いて心房や心室等の比較的多種類の領域を分類しようとするものである。しかしながら本章で対象とするような巨視的な希釈曲線を得る目的には分類が詳細に過ぎ、またオートフルオロスコープの位置分解能を考慮すると実用的に満足 of いくものと考えすることはできない。

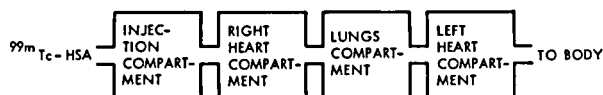
以下では大局的に中心循環系各部、すなわち右心入力部、右心部、肺部および左心部の希釈曲線を得ることを主目的として、各画素の計数率曲線の極大値到達時刻と画素相互の 2 次元的連結性に注目して、RI 画像を 4 領域に分類する手法を提案し、若干の適用例についてその有効性を明らかにする。さらに、このようにして得られた左心部について、関心領域を構成する

各画素を、計数率曲線の心拍に対応する周波数成分に関する位相差を利用して2分割し心室部分を分離する。その結果得られる心室容積変化曲線は心拍出量と組合せることによって心臓のポンプ機能の診断に有効な資料となるものである (Hirakawa, 1977)。

2.2 関心領域の自動設定

関心領域 (ROI) を定めるためには、文字通り関心のある対象を規定する必要がある。そこで、第 2.4 図に示すように、中心循環系を単純化して上大静脈等の右心入力部、右心部、肺部および左心部の 4 つのコンパートメントから成ると考え、各コンパートメントで RI は瞬時に完全混合され

ると仮定する。このような中心循環



第 2.4 図 中心循環系のコンパートメントモデル

系のコンパートメントモデルを念頭において、心臓部が視野の中央にくるように設置したオートフルオロスコープで計測された RI アンギオカーディオグラムから、各コンパートメントの希釈曲線を得るための関心領域を自動的に定めることが本節の目的である。

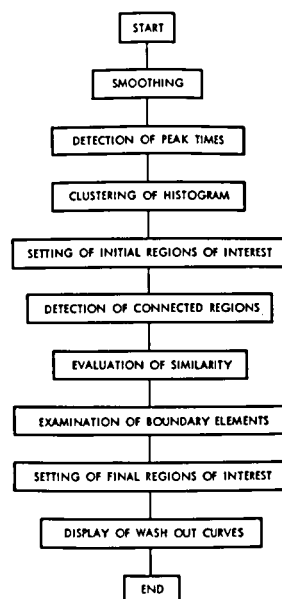
以下、RAO 30° のデータを例にとり、第 2.5 図の流れ図にそって関心領域設定の処理手順を説明する。ここに RI アンギオカーディオグラムのデータは 294 個の画素ごとに 0.1 秒の時間々隔で RI 投与後 12.8 秒間計測されたものである。

まず各画素の計数率曲線を大略心拍周期に相当する区間で移動平均し、平滑化する。今画素 k の時刻 t_i における計数を $x_k(t_i)$ とすると、その移動平均 $X_k(t_i)$ は、

$$X_k(t_i) = \frac{1}{N} \sum_{j=i-\frac{N-1}{2}}^{i+\frac{N-1}{2}} x_k(t_j), \quad N; \text{ ODD}$$

となる。ここに N は心拍周期に相当する区間とする。すなわち心拍動の影響を除去した平均的な流れの巨視的挙動だけに注目することになる。

次に各画素について平滑化した計数率曲線の極大値到達時刻を検出する。直観的には 1 つのコンパートメントに属する画素の計数率は RI の流入とともに増加し、やがて最大値を記録し、RI の流出とともに減少



第 2.5 図 関心領域設定手順の流れ図

する一過性の曲線になると考えられる。しかし実際には臓器相互の重なりや、カメラの分解能のために1つの画素が同時にいくつかのコンパートメントに所属する場合がある。特にRAOの場合は解剖学的に右心部と左心部が互に重なって観測され、計数率曲線は双峰性になる。したがって各画素のコンパートメントへの帰属を定めるためには複数の極大値到達時刻を考慮する必要がある。それには、1次および2次の平滑化差分

$$\Delta X_k(t_i) = \frac{1}{N} \left[\sum_{j=i+1}^{i+N} X_k(t_j) - \sum_{j=i-N}^{i-1} X_k(t_j) \right]$$

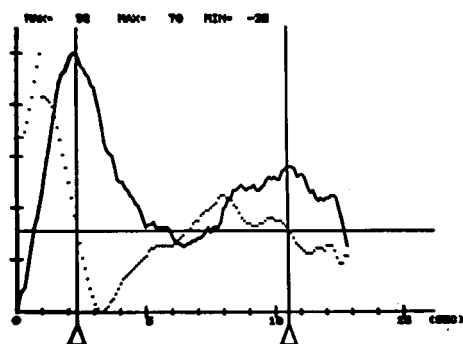
$$\Delta^2 X_k(t_i) = \frac{1}{N} \left[\sum_{j=i+1}^{i+N} \Delta X_k(t_j) - \sum_{j=i-N}^{i-1} \Delta X_k(t_j) \right]$$

を求め、適当な閾値 $\theta < 0$ および $\varepsilon \geq 0$ を設定し

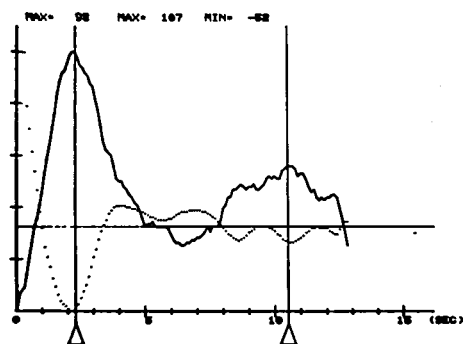
$$[|\Delta X_k(t_i)| \leq \varepsilon] \wedge [\Delta^2 X_k(t_i) \leq \theta] = \begin{cases} \text{true} ; d_{ki} = 1 \\ \text{false} ; d_{ki} = 0 \end{cases}$$

なる操作によって294個の各画素ごとに2値化系列 d_{ki} を求める。ここに記号 \wedge は論理積を表わす。こうして求めた d_{ki} の1が連続する区間が極大値の近傍であり、その中央に相当する t_j を極大値到達時刻の候補点とする。候補点が2個以上ある場合は、計数率の大きい方から2個とり、これらを極大値到達時刻とする。すなわち、1つの画素は高々2つのコンパートメントに所属すると仮定することになる。

このようにして極大値到達時刻を求めた1例を第2.6図に示す。図はRAO 30°に設置した



(a)



(b)

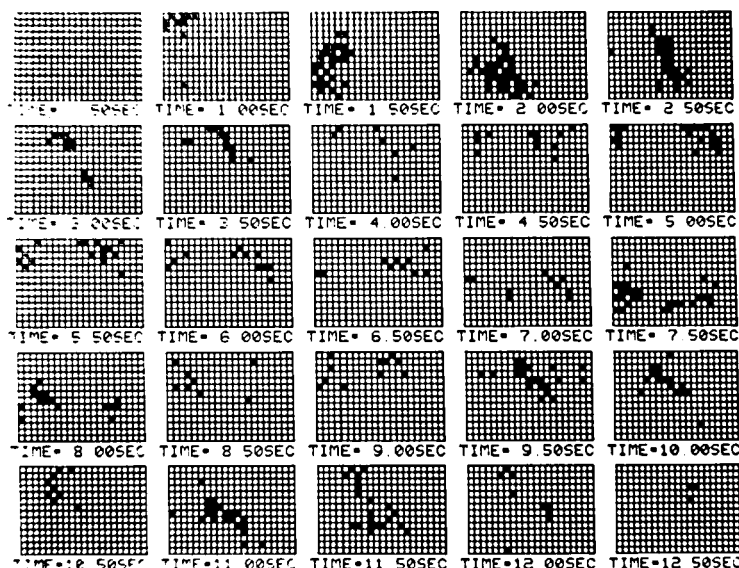
第2.6図 極大値到達時刻の検出

(a) 平滑化計数率曲線と1次差分

(b) 平滑化計数率曲線と2次差分

オートフルオロスコープの RI 画像中央付近の 1 画素についての例であり、(a)は平滑化計数率曲線とその 1 次差分（点線），(b)は同じく 2 次差分（点線）を示している。ここに目盛のない横軸はそれぞれの差分値の零軸を表わしている。

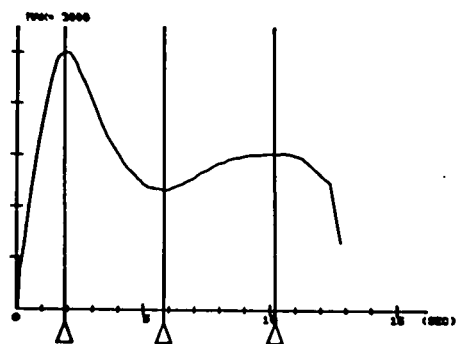
第 2.7 図は極大値到達時刻を RI 画像上の位置で表示したもので、0.5 秒ごとの時間々隔で RI 輸送過程の様子を大局的につかむことができる。ここに図上方は頭側、向って左側は被検者の右手方向である。



第 2.7 図 RI 輸送過程の表示

次に横軸に時刻 t を 0.2 秒ごとに 12.8 秒までとり、縦軸にその時刻を極大値到達時刻とする画素の個数をとったヒストグラムを作成し、これを右心入力、右心、肺および左心の各部に対応するクラスタに分割する。それには、まず

RI 画像の中央部に 10×15 の領域をとり、この領域全体の計数率曲線を求める。第 2.8 図はその 1 例である。心臓部が画像の中央に位置するようにカメラを設置してあるので、この領域は主に右心部と左心部によって占られている。したがって曲線の第 1 峰は右心部、第 2 峰は左心部また中間の谷は肺部に RI が存在する中心時刻に対応すると考えることができる。このよ

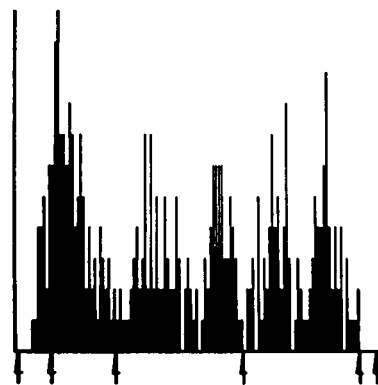


第 2.8 図 RI 存在中心時刻の推定

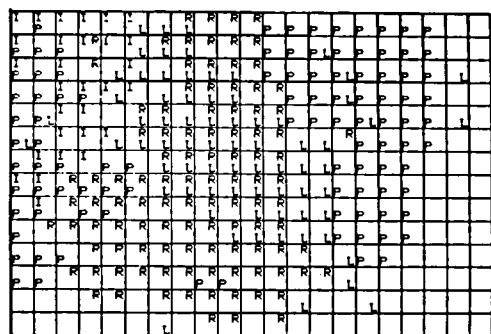
うにして推定した各コンパートメントにおける RI 存在の中心時刻を手がかりに、ヒストグラム上でそれらの中間付近の谷を分割点として選択した結果を第 2.9 図に示す。

第 2.10 図 (a) はヒストグラムの分割で得られた各ク
ラスタに対応する関心領域を最初から順に右心入力部
(I), 右心部 (R), 肺部 (P) および左心部 (L) として
表示したものである。図の上方は頭側、向って左側は右
手方向である。右心部と左心部の重なりも検出されてい
ることがわかる。

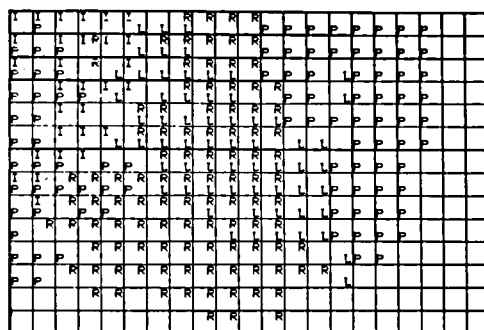
各関心領域ごとに画素の連結領域にラベリングし、面
積最大のものから若干個残し、いわゆるとび地を除去す
ると第 2.10 図 (b) が得られる。ここにラベリングのア
ルゴリズムには伝播法 (ローゼンフェルド, 1969) を利
用した。



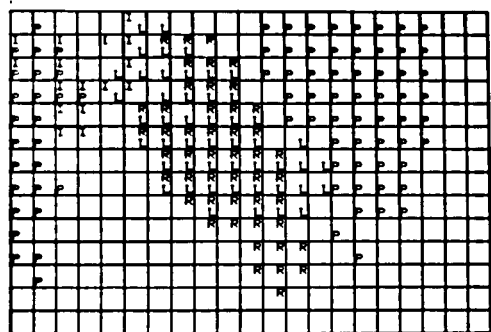
第 2.9 図 極大値到達時刻のヒストグラムとその分割



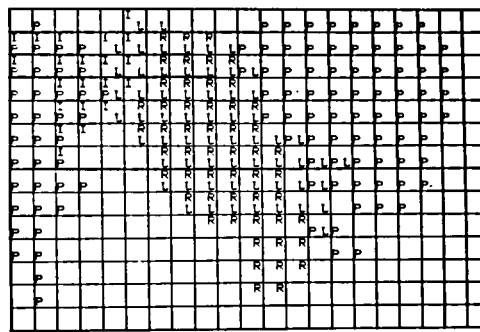
(a)



(b)



(c)



(d)

第 2.10 図 関心領域設定例 (RAO 30°)

- (a) ヒストグラム分割の結果
- (b) とび地の除去
- (c) 相似性による処理結果
- (d) 最終結果

残った各領域中の平均正規化計数率曲線

$$X(t_i) = \left[\sum_{k \in R} X_k(t_i) \right] / \left[\max_{t_i} \left\{ \sum_{k \in R} X_k(t_i) \right\} \right]$$

ここに $\sum_{k \in R}$ は 1 つの関心領域 R に属するすべての画素についての和を意味し、 \max_{t_i} は時刻 t_i に関する最大計数率を意味する。

を求め、これと各画素の正規化計数率曲線との残差 2 乗和を相似性の評価として、相似でない画素を領域から除く。ただし、残差 2 乗は対象となる関心領域に主として RI が存在している時間区間、すなわち前述のヒストグラム分割の時間区間についてだけ加算するものとする。第 2.10 図 (c) はこの結果である。

最後に各関心領域の境界を調査し、計数率曲線の相似な画素を付加して最終的な関心領域とする。これを第 2.10 図 (d) に示す。

なお、これらの処理は各段階ごとに途中結果をグラフィックディスプレイ上に表示し、オペレータの修正を求めるような対話形で実行される。

第 2.11 図には各部の希釈曲線を示す。(a), (b), (c) および (d) はそれぞれ右心入力部、右心部、肺部および左心部の希釈曲線である。また (e) は右心部と左心部の関心領域を併せたもので、いわゆる心放射図に相当する。

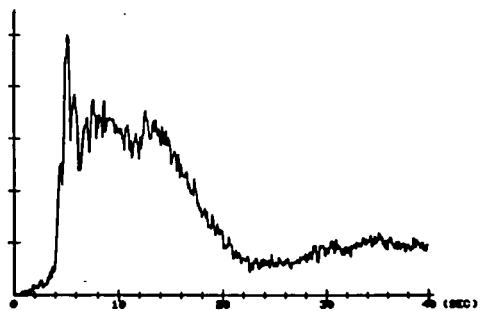
第 2.12 図と第 2.13 図には LAO 35° にカメラを設置した場合の処理例を示す。第 2.12 図 (a) は RI 輸送過程の様子、(b) は極大値到達時刻のヒストグラム、(c) はヒストグラムの分割で得られた関心領域、(d) はとび地の除去、(e) は相似性による処理結果、(f) は最終的に設定した関心領域である。ここに図の上方は被検者の右手方向、向って右側は頭部であり、また I, R, P, L はそれぞれ右心入力、右心、肺および左心の各部を意味する。

第 2.13 図には各部の希釈曲線が示されている。(a), (b), (c) および (d) はそれぞれ右心入力部、右心部、肺部および左心部の希釈曲線であり、(e) は心放射図である。

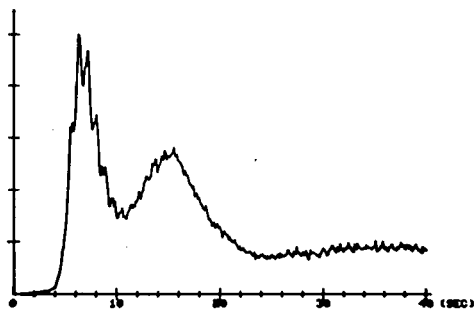
このようにして、中心循環系の巨視的なコンパートメントモデルに適合した希釈曲線を得る目的に対しては、十分実用に耐える関心領域を定めることができる。

2.3 心室の分離

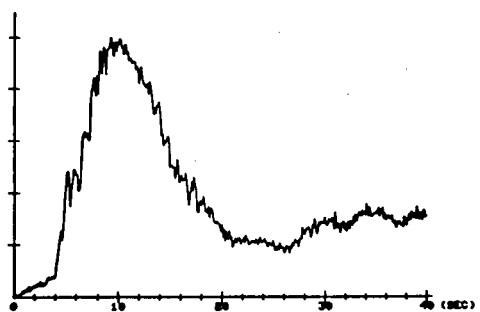
前節のような RI の流れの巨視的挙動だけからでは、心室部分を分離することは事実上困難である。一方、心室のポンプ機能からみて心室部分に属する各画素の計数率は同期して増減すると考えられ、また生理学 (松田編, 1969) によると心房と心室の容積は正常の場合第 2.14 図のような変化をするとされている。すなわち位相に差がある。そこで本節では、計数率曲線



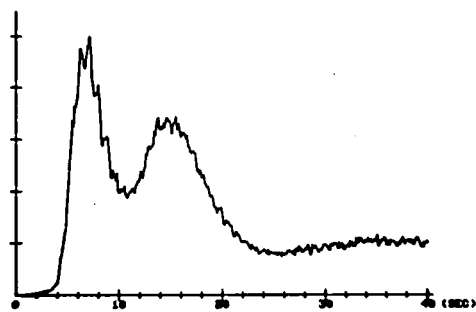
(a)



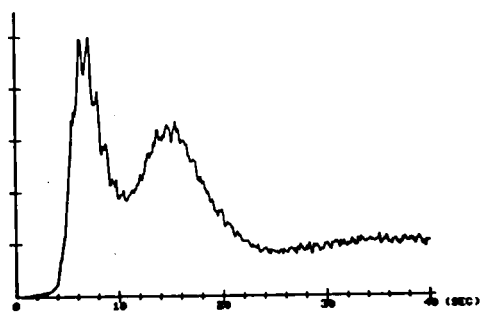
(b)



(c)



(d)



(e)

第 2.11 図 希釈曲線の例 (RAO 30°)

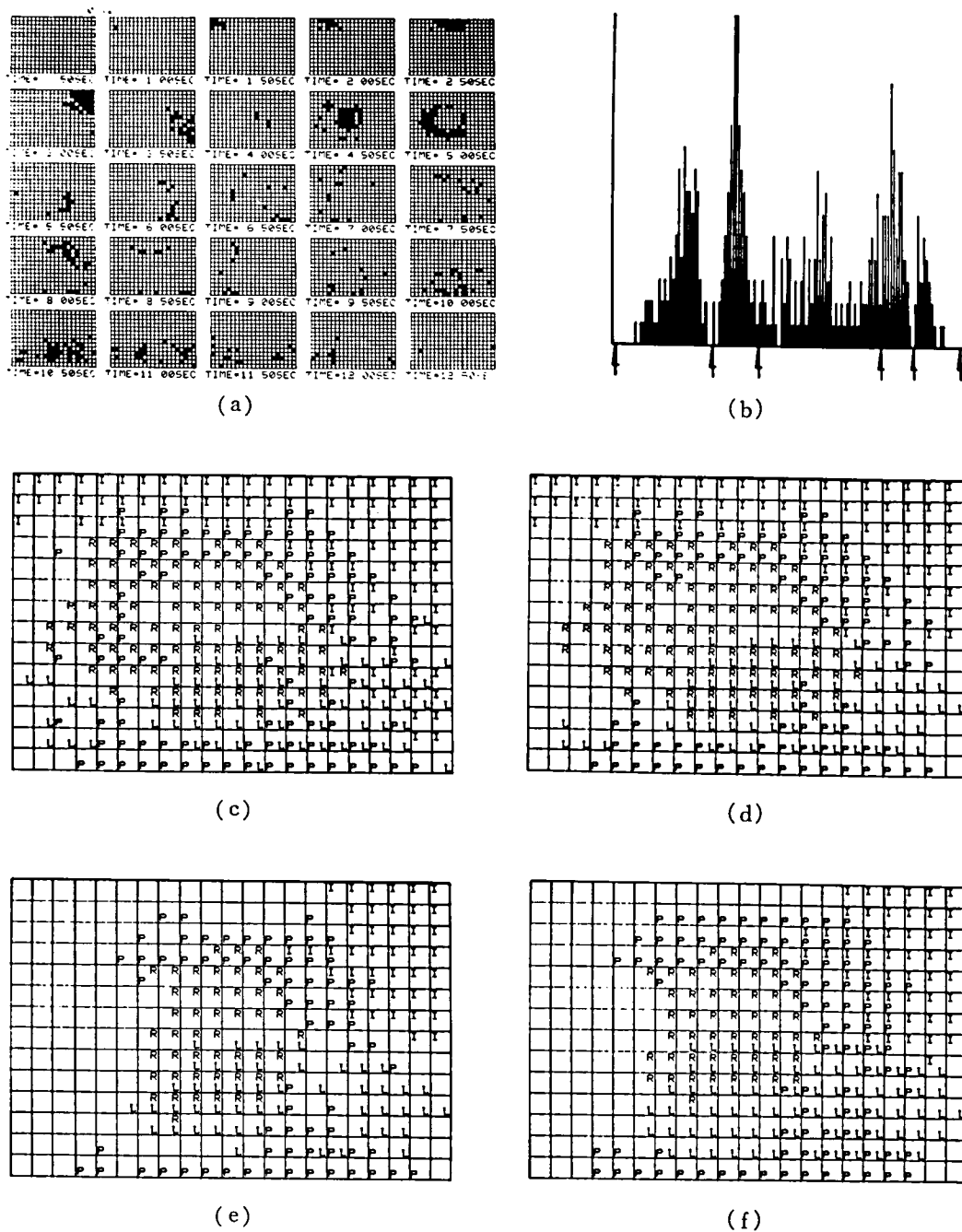
(a) 右心入力部 (I)

(b) 右心部 (R)

(c) 肺部 (P)

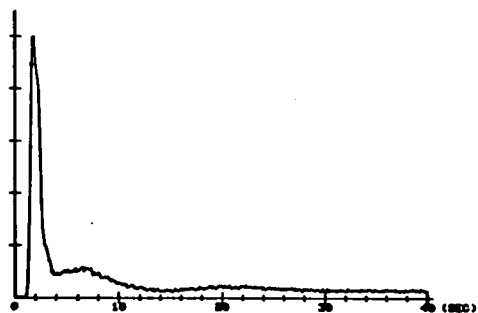
(d) 左心部 (L)

(e) 心放射図 (R+L)

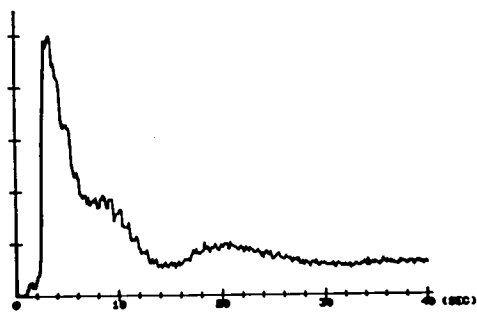


第 2.12 図 関心領域設定処理例 (LAO 35°)

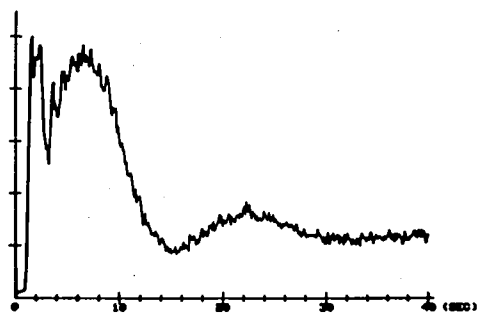
- (a) RI 輸送過程の表示
- (b) ヒストグラムとその分割
- (c) 初期関心領域
- (d) とび地の除去
- (e) 相似性による処理結果
- (f) 最終結果



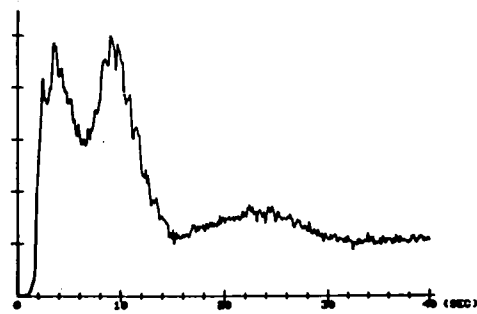
(a)



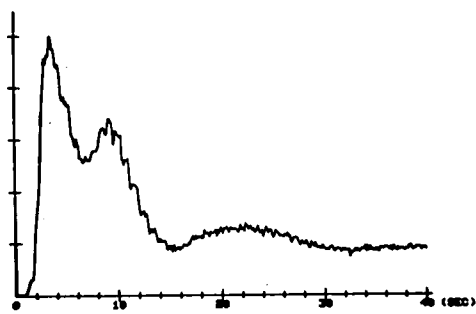
(b)



(c)



(d)



(e)

第 2.13 図 希釈曲線の例 (LAO 35°)

(a) 右心入力部 (I)

(b) 右心部 (R)

(c) 肺部 (P)

(d) 左心部 (L)

(e) 心放射図 (R+L)

の心拍に相当する周波数成分の位相差に注目した心室の分離法を論ずる。以下例をあげながら説明する。

まず前節で得られた左心部の関心領域をとり出し、この領域全体の計数率曲線を求める。次に、その領域に主として RI が存在する時間区間についてハミング窓(Hamming window) をかけた後フーリエ変換する(宮川, 1975)。

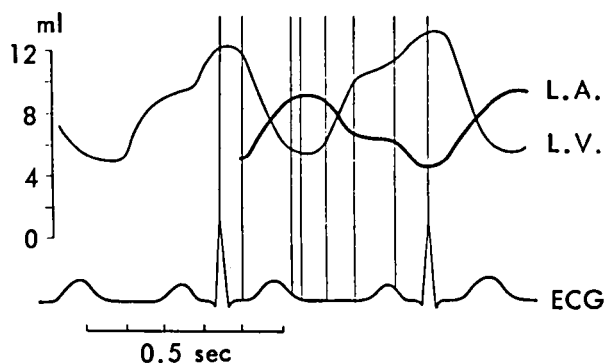
ここにハミング窓とは有限離散フーリエ変換による周波数分析に際して、両端部での波形の急激な変化による影響を軽減するための一種の荷重関数であり、時刻 t における計数率を $x(t)$ 、ハミング窓をかける区間を $[-T/2, T/2]$ とすると、ハミング窓をかけた結果 $y(t)$ は、

$$y(t) = x(t) \left\{ 0.54 + 0.46 \cos \left(2\pi \frac{t}{T} \right) \right\}$$

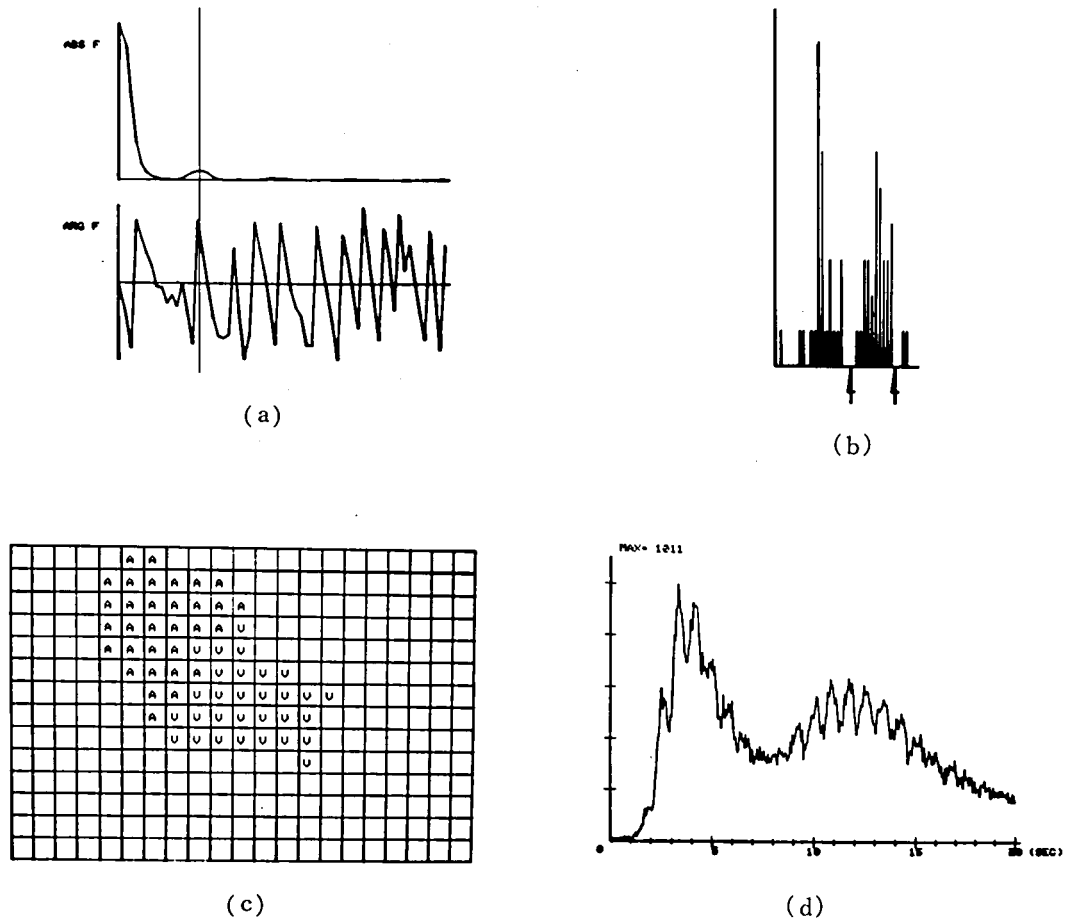
と表わされる。

このようにして得られたスペクトルの 1 例を第 2.15 図 (a) に示す。図は前節の RAO 30° の例における左心部の希釈曲線に対するものであり、横軸は周波数、上段は絶対値、下段は位相(偏角)を表わしている。

次にこのスペクトルから心拍の中心周波数を抽出する。同図の縦カーソル線がそれである。そして領域内各画素ごとにこの周波数におけるフーリエ係数の位相を計算し、位相分布のヒストグラムを作る。第 2.15 図 (b) はその例であり、横軸に位相を -180° から 180° まで 10° きざみでとってある。また横軸の両端はつながっていると考える。このヒストグラムから 2 つの矢印によって示されるような適当な閾値を設定し、1 塊のクラスタを心室部分として分離する。この結果を同図 (c) に示す。ここに左心室部分は V で、また残りの部分は便宜上左心房部分と考えて A で表わしてある。さらに同図 (d) には左心室部の希釈曲線を示す。このように分離された左心室部の領域は、RI 画像上でもまとまった領域を与え、またその希釈曲線には明確な心拍成分が観察される。これは、心拍周波数成分の位相差を特徴量とする心室関心領域分離法の有効性を明らかにしていると考えられる。



第 2.14 図 左心室 (L. V.) および左心房 (L. A.) 容積変化の概念図



第 2.15 図 左心室の分離 (RAO 30°)

- (a) 心拍中心周波数抽出
- (b) フーリエ係数の位相のヒストグラム
- (c) 左心房 (A) と左心室 (V)
- (d) 左心室の希釈曲線

第 2.16 図には第 2.15 図 (d) の左心室部希釈曲線において心臓の拍動が最も明確に表われている数拍について、この曲線を、それに心拍周期に相当する区間で移動平均を施して平滑化したもの、すなわち平均的な希釈曲線で除して得た左心室容積変化曲線が示してある。右心部等のバックグラウンド雑音のために正確な駆出率 (ejection fraction, EF)* は得られないが、心房収縮など心室容積変化の特徴は十分とらえることができる。

* EF は心室の駆出率を表わすパラメータで

$$EF = \frac{\text{心室拡張終期容積} - \text{心室収縮終期容積}}{\text{心室拡張終期容積}}$$

で定義される。

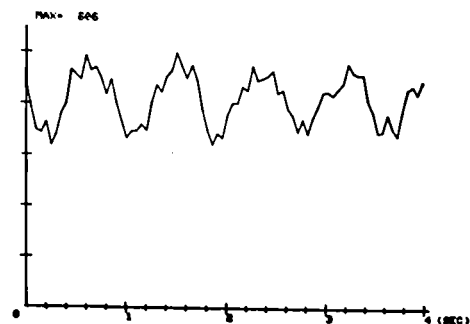
2.4 ま と め

本章では、オートフルオロスコープによって計測された RI アンギオカーディオグラムを対象に、中心循環系の巨視的なコンパートメントモデルを念頭において、右心入力部、右心部、肺部および左心部の関心領域 (ROI) を自動的に設定するための 1 手法を述べた。

この手法では、大局的な RI の流れの挙動に

注目し、各画素ごとに計数率曲線の高々 2 個の極大値到達時刻を検出することによって、RAO における右心部と左心部のような空間的に重なった 2 つの臓器に対する関心領域をも定めることができる。そして若干の処理例を挙げて、本手法が中心循環系各部の希釈曲線や心放射図を得る目的には十分適ったものであることを明らかにした。

さらに、巨視的な RI 動態だけでは分離の困難な心室部分を、心拍周波数に関するフーリエ係数の位相差を特徴量とすることによって抽出できることを示し、心室容積変化曲線を得た。



第 2.16 図 左心室容積変化曲線

第3章 心放射図のパラメータ推定

3.1 はじめに

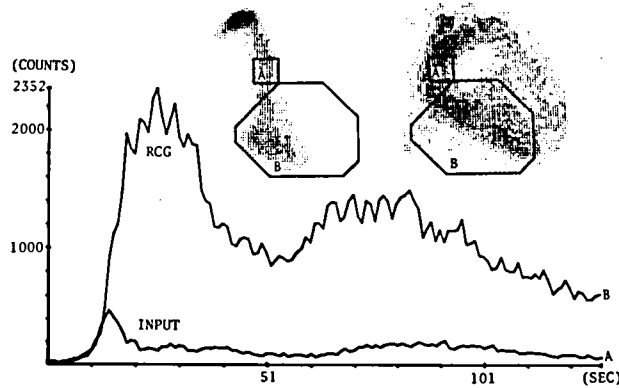
心放射図 (radiocardiogram, RCG) は非観血的な心拍出量の定量的検査法として広く用いられている。桑原, 平川らは 1967 年以来, 心臓循環系の RI 輸送過程を表わす数学モデルを作成し, アナログ計算機を用いたシミュレーションによって心拍出量のみならず循環系各部の血液量, 平均通過時間, 大動脈弁逆流率, 左心から右心への短絡率などを測定し, 臨床データとして提供している (Kuwahara, 1972, 1973; Motohara, 1974; Saito, 1973, 1974)。このシミュレーションは線形むだ時間系のパラメータ推定問題であって, 現在その処理は高速アナログ計算機を用いた人手によるモデル出力と実測データの曲線あてはめ法によっている。しかしながらこの方法では, 曲線あてはめの操作手順と技術にある程度の熟練を必要とするうえに, 高速アナログ計算機の入手も必ずしも容易でない。そこで現在比較的入手の容易なミニコンピュータに適した心放射図の数学モデルのパラメータ推定アルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは心放射図をフーリエ変換し周波数領域においてパラメータの最小 2 乗推定を行うものであって, 処理結果や処理時間の点で, 現用の高速アナログ計算機による手法に比較しても遜色のない十分実用に耐えるものである。本章ではこの手法について述べるとともに若干の処理例を示す。

3.2 心放射図とその数学モデル

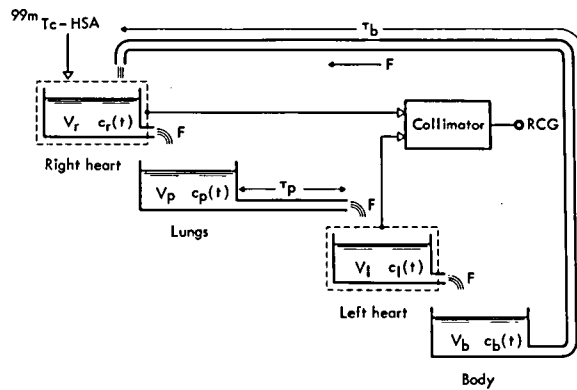
3.2.1 心放射図の計測

$^{99m}\text{Tc-HSA}$ (^{99m}Tc 標識ヒト血清アルブミン) 5mCi を肘静脈より急速注入した後の RI 輸送過程を, 前胸部に置いたシンチレーションカメラで計測する。右心入力部の RI 動態および心放射図を得るために, 第 2 章の手法あるいはオペレータの人手によって, 上大静脈および心臓部を覆う 2 つの関心領域を設定し, この両者の 0.2 秒ごとの計数率を約 1 分間にわたって記録したものを実測データとして用いる。なお, RI が全身に均等に分布したと考えられる平衡状態での計数率も同時に記録する。第 3.1 図は実測データの一部である。

3.2.2 RI 輸送過程の数学モデル



第 3.1 図 実測心放射図の 1 例



第 3.2 図 心臓循環系 RI 輸送過程のモデル

正常な心臓循環系での RI 輸送過程を第 3.2 図に示すようなプロセスで近似する。すなわち、右心と左心をそれぞれ 1 つのコンパートメントで、肺循環系と体循環系をそれぞれ 1 つのコンパートメントと輸送おくれ時間で表わす。図中の下添字 r, p, l および b はそれぞれ右心、肺循環系、左心および体循環系を意味する。また V [ml] は各部の等価平均容積、 $c(t)$ [$\mu\text{Ci}/\text{ml}$] は時刻 t における RI の平均血中濃度、 F [ml/s] は平均血流量、 τ_p, τ_b [s] は肺循環系および体循環系の輸送おくれを表わすむだ時間である。このような近似は心臓の拍動を無視しており、肺および体循環系を簡略化して考えているとはいえ、心臓循環系における物質輸送の本質からは離れていないと考えられる。

この系に総量 I [μCi] の RI を時間 τ [s] 内に肘静脈から注入した場合、注入部位を 1 つのコンパートメントと考えると、その RI 輸送過程は

$$V_i \frac{dc_i(t)}{dt} = i(t) - F_i c_i(t) \quad (3.1)$$

$$i(t) = \begin{cases} I/\tau, & 0 \leq t \leq \tau \\ 0, & t > \tau \end{cases}$$

$$\int_0^{\infty} i(t) dt = I$$

で表わされる。ここに $i(t)$ [$\mu\text{Ci/s}$] は RI の一定注入速度、 V_i 、 F_i および $c_i(t)$ はそれぞれ注入部位の等価平均容積、平均血流量および平均血中濃度である。したがって上大静脈の右心入力部で計測される RI 動態は、注入部位から右心入力部までの輸送おくれ時間 τ_i [s] を考慮して、

$$y_i(t) = \tau_i V_i c_i(t - \tau_i) \quad (3.2)$$

で表わすことができる。ここに τ_i は右心入力部に対する計測系の利得を表わす。

右心、肺循環系、左心および体循環系における RI の輸送過程は、血流量が時間的に一定であると仮定し、また再循環、中隔欠損による左心から右心への短絡を考慮して、次のような線形微分差分方程式で表わされる。ただし F_i は F に比べて十分小さいとして、右心への流入以外では無視している。

右心：

$$\begin{aligned} V_r \frac{dc_r(t)}{dt} = & F_i c_i(t - \tau_i) + (1 - k) F c_b(t - \tau_b) \\ & + k F c_l(t) - F c_r(t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

肺循環系：

$$V_p \frac{dc_p(t)}{dt} = F c_r(t) - F c_p(t) \quad (3.4)$$

左心：

$$V_l \frac{dc_l(t)}{dt} = F c_p(t - \tau_p) - F c_l(t) \quad (3.5)$$

体循環系：

$$V_b \frac{dc_b(t)}{dt} = (1 - k) F c_l(t) - (1 - k) F c_b(t) \quad (3.6)$$

ここに k は左心から右心への短絡率である。また RI 血中濃度の初期値および初期関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} c_i(t) &= 0, & -\tau_i \leq t \leq 0 \\ c_r(0) &= 0 \\ c_p(t) &= 0, & -\tau_p \leq t \leq 0 \\ c_l(0) &= 0 \\ c_b(t) &= 0, & -\tau_b \leq t \leq 0 \end{aligned}$$

前胸部に置かれたシンチレーションカメラとグラフィックディスプレイ上に設定した関心領域によって計測される RI 計数率 $y(t)$ は、関心領域が心臓部をちょうど覆っており心臓以外の部位の RI は無視できるものとし、さらに右心および左心に対する感度が等しくなるように心放射図を計測するものとすれば、

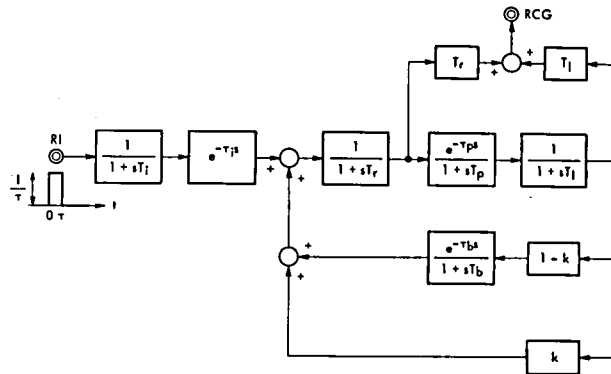
$$y(t) = r [V_r c_r(t) + V_l c_l(t)] \quad (3.7)$$

と表わすことができる。ここに r は心臓部全域に対する計測系の利得である。第 (3.7) 式が通常心放射図と呼ばれるものに相当する。

ある時刻 t に各部位に存在する RI の総量に注目し、第 (3.1) ~ (3.7) 式をラプラス変換してブロック線図で表現すれば第 3.3 図のようになる。ここに各部位の時定数は、

$$\begin{aligned} T_i &= V_i / F_i, & T_r &= V_r / F, & T_p &= V_p / F, \\ T_l &= V_l / F, & T_b &= V_b / (1 - k) F \end{aligned}$$

である。



第 3.3 図 数学モデルのブロック線図

曲線あてはめ法によってこれらのパラメータを推定すれば、各部位の平均通過時間は右心と左心についてはその時定数で、肺循環系と体循環系については時定数と輸送おくれ時間の和で与えられる。また平衡状態における RI の平均血中濃度を $c(\infty)$ とすれば、次の関係式が得られる。

$$F c(\infty) = \frac{I}{V/F}$$

$$= \frac{I}{T_r + T_p + \tau_p + T_l + (1-k)(T_b + \tau_b)} \quad (3.8)$$

ここに V は全循環血液量である。第 (3.8) 式の右辺の分母の量はすべてパラメータ推定で定まり、 I は既知であるから、 $c(\infty)$ を実測することによって平均血流量 F 、すなわち心拍出量を決定することができる。

3.3 シミュレーションの自動化

3.3.1 パラメータ推定問題の設定

実測された心放射図と先に示した数学モデルから計算されたシミュレーション結果を比べることによって、数学モデルのパラメータを推定する。パラメータ推定にあたっては、ミニコンピュータとグラフィックディスプレイを使用し、たかだか数分以内の短時間で処理することを目標とした。したがって本節の目的は、線形微分差分方程式で記述されたモデルに対する効率的なパラメータ推定法の開発である。この観点から問題を設定すれば次のようになる。「第 (3.1) 式および第 (3.3) ~ (3.6) 式を状態方程式とし、第 (3.2) 式および第 (3.7) 式を観測方程式とする線形むだ時間系のパラメータ： $r_i, \tau, T_i, \tau_i, r, T_r, T_p, \tau_p, T_l, T_b, \tau_b$ および k を推定せよ。」ただし第 (3.2) 式および第 (3.7) 式に対応する実測データは 0.2 秒ごとに 256 点与えられる。

これらの実測データは各部位における平均通過時間に比べて十分細かい時間々隔で収録されているので、心放射図の波形変化はほとんど失なわれていないと考えられるが、雑音として RI 計数率自身の有する統計的雑音のみならず、モデルに考慮されていない心拍動の影響など数学モデルと実在のシステムとの差によって生ずる雑音、肺、肝臓などの他臓器からのバックグラウンド雑音、およびシンチレーションカメラの特性ひずみなどが複合したものを含んでいると考えなければならない。雑音の性質が明らかな場合には、それに適した推定法を用いることもできるかもしれないが、この場合は実測データに含まれる雑音の性質を正確に知ることができ

ないので、推定法としては最小2乗推定を採用することにした。すなわち右心入力部 RI 動態および心放射図に対する評価関数として、実測データとモデル計算値との残差2乗和：

$$J_i = \sum_n [\tilde{y}_i(t_n) - y_i(t_n)]^2 \quad (3.9)$$

および

$$J = \sum_n [\tilde{y}(t_n) - y(t_n)]^2 \quad (3.10)$$

をとり、これらを最小にするパラメータの値を推定値と考える。ここに \sim は実測データを意味し、 t_n は n 番目の実測データが与えられている時刻を表わす。もしも雑音が分散一定の白色正規かつ加法的な観測雑音だけであれば、この推定は最尤推定となることは明らかである。

3.3.2 周波数密法

上述のパラメータ最小2乗推定の計算にあたって問題となるのは、第(3.10)式の評価関数 J の計算法とパラメータ推定に要する処理時間の短縮法である。

第(3.9)式の評価関数 J_i は $y_i(t)$ の解析解が得られるため簡単に計算することができる。一方第(3.10)式中の $y(t)$ を得るには数値計算によらなければならない。数学モデルの状態方程式を時間軸に沿って Runge-Kutta 法などで逐次的に積分する方法は、むだ時間が未知パラメータとして存在するために手続きが煩雑になる。また、ラプラス変換で得られたいわゆる s 領域の伝達関数を数値的に逆ラプラス変換して時間領域の数値解を求める方法も、多数回の複素関数の計算と高速フーリエ変換(FFT)を繰返し必要とする。両方法ともミニコンピュータでは長い計算時間を要し実用的でない。

さて、心放射図の実測データと数学モデルの計算値はともに直流成分としての定常値を有し、このままではフーリエ変換できない。しかしあらかじめこれらの定常値を差し引いておけば、フーリエ変換可能とすることができる。フーリエ変換によれば伝達関数が解析的に得られるのみならず、残差2乗和が変換の前後で不変に保たれ、これが数値計算上の利点となる。すなわち第(3.7)式の $y(t)$ から理論的定常値を差し引いてフーリエ変換すれば次式が得られる。

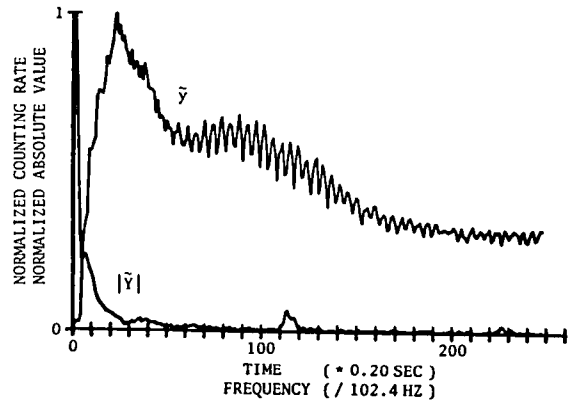
$$Y(j\omega) = \frac{r [T_r(jT_p\omega+1)(jT_l\omega+1)(jT_b\omega+1) + T_l(jT_b\omega+1)e^{j\tau_p\omega}]}{[(jT_r\omega+1)(jT_p\omega+1)(jT_l\omega+1)(jT_b\omega+1) - (1-k)e^{-j(\tau_p+\tau_b)\omega}]^*} \\ * \frac{(1-e^{-j\tau\omega})e^{-j\tau_l\omega}}{-k(jT_b\omega+1)e^{-j\tau_p\omega}(jT_l\omega+1)j\omega} - \frac{r\tau(T_r+T_l)}{[T_r+T_p+\tau_p+T_l+(1-k)(T_b+\tau_b)]j\omega} \quad (3.11)$$

ここに ω はフーリエ変換領域の角周波数である。したがって数学モデルは ω に関する有理関数と指数関数から成る単なる代数式で表現できたことになる。またフーリエ変換の正規直交性から第(3.10)式の評価関数 J を ω 領域で直接計算することができる。すなわち、

$$J = \sum_n [\tilde{Y}(j\omega_n) - Y(j\omega_n)] \overline{[\tilde{Y}(j\omega_n) - Y(j\omega_n)]} \quad (3.12)$$

となる。ここに $\tilde{Y}(j\omega_n)$ は実測データ $\tilde{y}(t_n)$ ($n = 1, \dots, 256$) から平衡状態における直流成分を差し引いてフーリエ変換したものの離散的表示である。また $\overline{}$ は共役複素数を示す。このようにすると数学モデルの微分差分方程式を直接解くことなく評価関数を計算することができる。

第3.4図は心放射図 $\tilde{y}(t)$ とそのフーリエ変換後の絶対値 $|\tilde{Y}(j\omega)|$ の周波数スペクトルの1例を示しているが、この図から明らかに $|\tilde{Y}(j\omega)|$ はほとんど低周波成分だけから構成されており、さらに心拍動に対応する成分はこの低周波成分から十分に分離されている。したがって第(3.12)式において、比較的寄与の大きい低周波成分だけについて総和を計算したものを J のかわりに評価関数として用いることにすれば、雑音や心拍動の影響を除き、しかも有効な情報をそこなくなく評価関数の計算時間を短縮することができる。



第3.4図 実測心放射図とそのフーリエ変換後の絶対値の周波数スペクトル

このように周波数領域に窓を設け、その内部だけで曲線あてはめをしてパラメータを推定する方法を便宜上周波数窓法 (window method in frequency domain) と呼ぶことにする。

3.3.3 数学モデルの性質とパラメータ感度解析

第(3.11)式は推定すべきパラメータの値の組と1対1に対応しており、構造可同定 (Bellman, 1970) である。すなわち、雑音を含まずかつ十分な情報を含む実測データが与えられれば、パラメータを一意的に決定できる。しかしながら実際には実測データは有限個でしかも雑音に汚されているため、評価関数は一般的には多峰性になると考えなければならない。この場合、初期推定値すなわちパラメータ推定の出発値の設定が非常に重要になる。もしもパラメ

ータを段階的に分割して推定することができれば、出発値の設定が容易になり、評価関数の最小化の過程で局所的な極小値に陥る危険性が減少する。

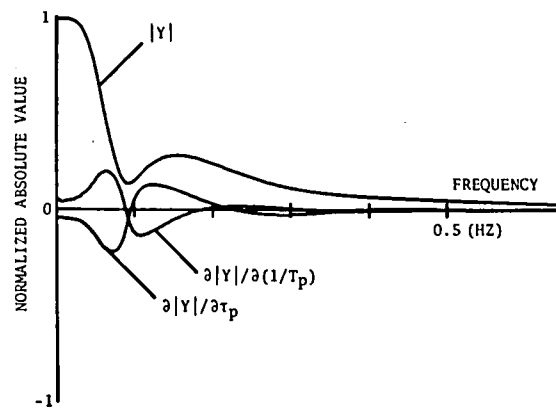
そこでパラメータの段階的推定のための分割について検討する。RI 注入部位に関するパラメータ τ および T_l は、右心入力部の実測データと第 (3.9) 式の評価関数 J_i から他のパラメータと独立に推定できることは明らかである。心放射図のフーリエ変換からその他のパラメータを推定するのであるが、この過程をさらに分割するためには、数学モデルに対する各パラメータの影響の様子を知る必要がある。このために感度解析の手法を用いることができる。

第 3.5 図に、肺循環系に関するパラメータ $1/T_p$ と τ_p の生理的標準値における数学モデル $Y(j\omega)$ に対するパラメータ感度の計算

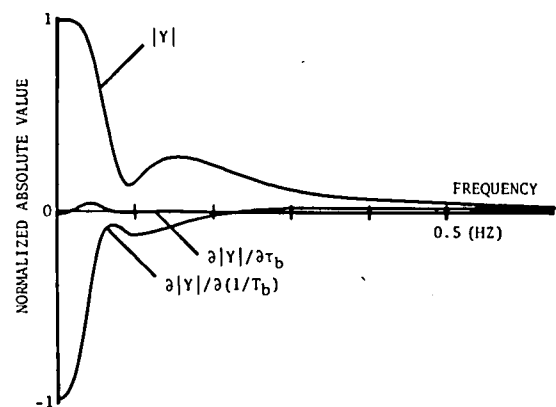
例を示す。この図から $\partial Y / \partial (1/T_p)$ と $\partial Y / \partial \tau_p$ は互いにほとんど 1 次従属な関係にあり、評価関数 J の最小化過程で数値的不安定に陥る可能性があることがわかる。最終的に必要とする量が平均通過時間、すなわち $T_p + \tau_p$ であること、および τ_p に関しては比較的信頼できる初期推定値が定められることを考慮して、

あらかじめ τ_p を固定するのが得策である。第 3.6 図には体循環系のパラメータ $1/T_b$ と τ_b の感度を示す。 τ_b は $Y(j\omega)$ に対する影響が小さく、初期推定値も比較的定めやすいことを考慮すると、 τ_p と同様に固定してもよいと考えられる。また $\partial Y / \partial (1/T_b)$ は非常に低い周波数でだけ大きな成分を有し、他のパラメータとほとんど直交している。このことから超低周波成分を評価関数 J の計算から除くことによって、他のパラメータを T_b と分離して推定できることがわかる。同

様に、短絡率 k と左心の時定数 T_l は $k = 0$ の近傍では相補的であり、両者の影響を明確には区別し難いことがわかる。したがって短絡の有無の判定はさしあたっては医師もしくはオ



第 3.5 図 パラメータ感度曲線 (1)



第 3.6 図 パラメータ感度曲線 (2)

ペレータにゆだね、通常は $k = 0$ と固定し、短絡があると判断された場合は改めて k と T_l を再推定することにする。

定性的ながら、上述のパラメータ感度を参考にした考察から、心放射図のパラメータ推定は (r_i, τ, T_i) , $(r, T_r, T_p, T_l, \tau_i)$, (k, T_l) および (T_b) の4段階に分割することが可能であり、これによって探索空間の次元を最大5次元に減らすことができる。

3.3.4 パラメータ推定の手順

第3.7図は心放射図のパラメータ推定手順を示す流れ図である。すなわち、

i) 右心入力部の実測データから注入部位に関するパラメータ r_i , τ および T_i を最小2乗推定によって定める。ここに対応する数学モデルの出力 $y_i(t)$ と評価関数 J_i はそれぞれ次式で与えられる。

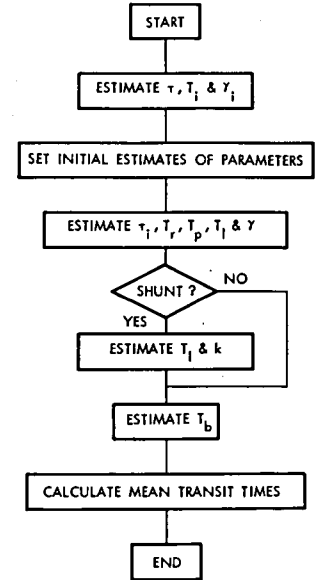
$$y_i(t') = \begin{cases} 0, & t' < -\tau \\ r_i(1 - e^{-(t'+\tau)/T_i}), & -\tau \leq t' < 0 \\ r_i(1 - e^{-\tau/T_i})e^{-t'/T_i}, & 0 \leq t' \end{cases} \quad (3.13)$$

$$J_i = \sum_n [\tilde{y}_i(t'_n) - y_i(t'_n)]^2 \quad (3.14)$$

ただし、時刻 t' の原点は右心入力部 RI 動態実測データの最大値を与える点にとり、また第(3.14)式の総和は右房あるいは肺などのバックグラウンド雑音を除去するため、 t' の原点の両側数秒間だけをとるものとする。

ii) 実測心放射図からパラメータ推定の出発値を定める。すなわち、 τ_p に対しては心放射図の第1峰から第1谷までの時間、 τ_b は第1谷から第2峰までの時間、 τ_i は RI 注入後心放射図がはじめてその最大値の5%になるまでの時間とし、また $k = 0$ と固定する。 T_b はモデルの平衡状態がほぼ実測データと合致するように設定するが、 r , T_r , T_p , T_l は GMDH を適用して作成した次のような予測式から計算する。すなわち、

$$\left. \begin{aligned} r &= 1.999 + 0.469\alpha + 0.526\beta + 0.105\alpha\beta \\ \alpha &= 7.644 - 1.013T_2 - 5.786\tau + 0.636T_2\tau \end{aligned} \right\} \quad (3.15)$$



第3.7図 心放射図解析の流れ図

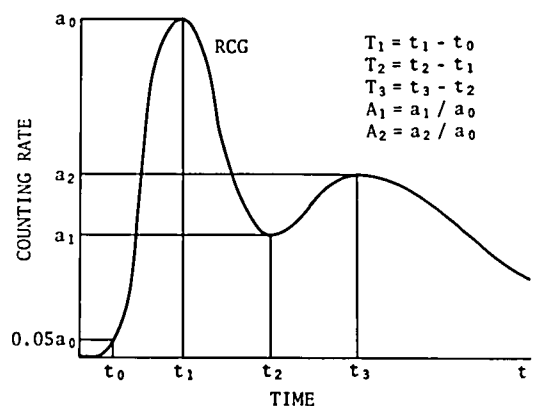
$$\begin{aligned}
 & \beta = -2.170 + 0.481\tau + 4.689\frac{1}{T_i} - 3.072\tau\frac{1}{T_i} \\
 & T_r = 2.841 + 0.291\alpha + 0.556\beta + 0.033\alpha\beta \\
 \text{ただし} \quad & \alpha = -3.084 + 1.214T_2 - 1.188T_3 + 0.099T_2T_3 \\
 & \beta = -3.572 + 0.030T_2 - 2.851A_1 + 2.320T_2A_1
 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} & \beta = -2.170 + 0.481\tau + 4.689\frac{1}{T_i} - 3.072\tau\frac{1}{T_i} \\ & T_r = 2.841 + 0.291\alpha + 0.556\beta + 0.033\alpha\beta \\ & \alpha = -3.084 + 1.214T_2 - 1.188T_3 + 0.099T_2T_3 \\ & \beta = -3.572 + 0.030T_2 - 2.851A_1 + 2.320T_2A_1 \end{aligned}} \right\} (3.16)$$

$$\begin{aligned}
 & T_p = 6.914 - \tau_p + 0.902\alpha + 0.094\beta + 0.003\alpha\beta \\
 \text{ただし} \quad & \alpha = -5.876 + 0.808T_2 + 0.263T_3 + 0.047T_2T_3 \\
 & \beta = -10.358 + 2.482T_2 + 7.575A_1 - 2.296T_2A_1
 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} & T_p = 6.914 - \tau_p + 0.902\alpha + 0.094\beta + 0.003\alpha\beta \\ & \alpha = -5.876 + 0.808T_2 + 0.263T_3 + 0.047T_2T_3 \\ & \beta = -10.358 + 2.482T_2 + 7.575A_1 - 2.296T_2A_1 \end{aligned}} \right\} (3.17)$$

$$\begin{aligned}
 & T_1 = 2.999 + 0.626\alpha + 0.336\beta + 0.024\alpha\beta \\
 \text{ただし} \quad & \alpha = -2.492 + 0.251T_2 - 0.588T_3 + 0.172T_2T_3 \\
 & \beta = -6.295 + 0.433T_2 + 1.138A_2 + 1.150T_2A_2
 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} & T_1 = 2.999 + 0.626\alpha + 0.336\beta + 0.024\alpha\beta \\ & \alpha = -2.492 + 0.251T_2 - 0.588T_3 + 0.172T_2T_3 \\ & \beta = -6.295 + 0.433T_2 + 1.138A_2 + 1.150T_2A_2 \end{aligned}} \right\} (3.18)$$

である。ここに T_1 , T_2 , T_3 , A_1 および A_2 は第 3.8 図に示すように実測心放射図の形状から計算される量であり, T_1 は最大値の 5% の時刻から第 1 峰までの時間, T_2 は第 1 峰から第 1 谷までの時間, T_3 は第 1 谷から第 2 峰までの時間, A_1 は最大計数率に対する第 1 谷計数率の比率また A_2 は同じく第 2 峰計数率の比率である。さらに τ , $1/T_i$ および τ_p は上で推定した値を用いる。

これらの予測式の導出には GMDH の手法 (Ivakhnenko, 1968) を適用し, 短絡のない心放射図 17 例をトレーニングデータとして用い, またあくまでも出発値の予測であることを考慮して, 部分表現 (初等アルゴリズム) には比較的簡単な



第 3.8 図 出発値予測式における入力変数の説明

$$c_0 + c_1x + c_2y + c_3xy \quad (3.19)$$

なる式を採用した。この式の未知係数は4個であるが、積の項を含むので比較的広い範囲の非線形性に対応できると考えられる。さらに閾値による選択は2段階にとどめている。

Ⅲ) 心放射図のフーリエ変換 $\tilde{Y}(j\omega)$ と第(3.11)式の数学モデルおよび第(3.12)式の評価関数 J を用いて τ , τ_i , T_r , T_p および T_l を推定する。この場合出発値における数学モデルのパラメータ感度を参考にして、雑音とみられる高周波成分と T_b の影響が支配的な超低周波成分を除いて周波数領域に窓を設け、パラメータの寄与の大きな10点余りの周波数成分についてだけ第(3.12)式の総和をとるものとする。このような周波数窓法を用いることによって評価関数の計算時間が非常に短縮される。

Ⅳ) 左心から右心への短絡が存在する場合には、 T_l と k を再推定する。

Ⅴ) 数学モデル計算値と実測データの平衡状態が一致するように T_b を推定する。

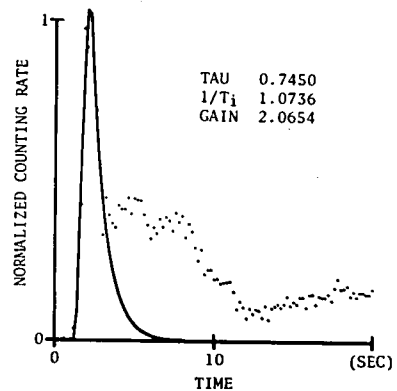
Ⅵ) 各部の平均通過時間、心拍出量、短絡率などを計算しシミュレーション結果を表示する。

これらの手順における評価関数の最小化には Fletcher-Powell 法 (Fletcher, 1963; Kuester, 1973) を使用し、勾配の計算には数値的差分 (Birta, 1976) を用いる。また結果を表示するための数学モデルの数値計算には数値逆ラプラス変換法 (Ichikawa, 1975) を使用し、フーリエ変換には高速フーリエ変換を適用する。

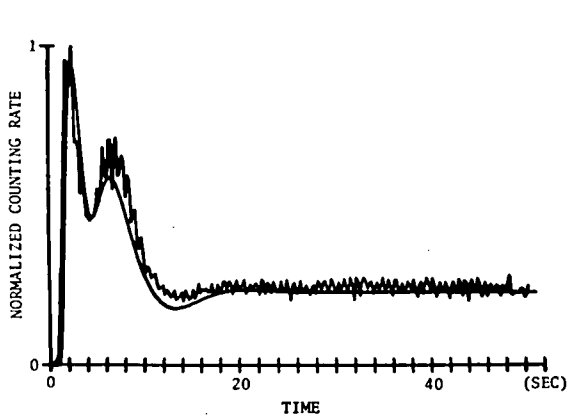
上述の推定はほとんど自動的に行われるが、評価関数の多峰性に基づく推定値の逸脱を防ぐために、各段階で途中結果を表示してオペレータの介入を可能にし、シミュレーション結果の信頼性を高めている。

3.3.5 処理例

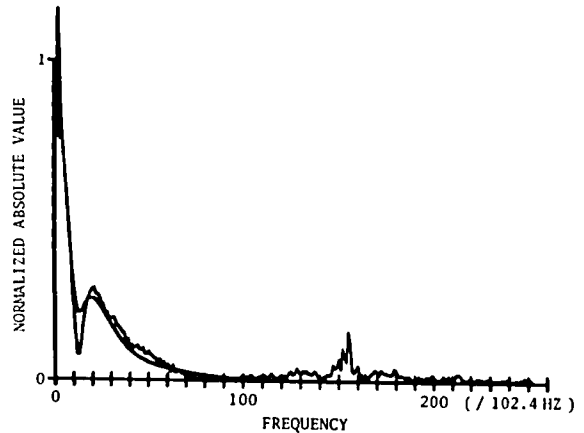
正常例 (15才男) 心放射図に対するパラメータ推定の処理過程を第3.9図~第3.12図に示す。第3.9図は右心入力部の実測データのシミュレーション例である。第3.10図は前節Ⅱ)で述べた出発値におけるモデルの計算例である。周波数領域における $\tilde{Y}(j\omega)$ と第(3.11)式のモデル $Y(j\omega)$ との曲線あてはめの結果が第3.11図である。ここにあてはめをしている周波数範囲は大略 0.06~0.17 Hz であり、図中の最初の下降脚の部分だけに相当する。このようにして得られたパラメータ推定値での時間領域におけるシミュレーション結果は、第3.



第3.9図 右心入力部実測データの曲線あてはめ



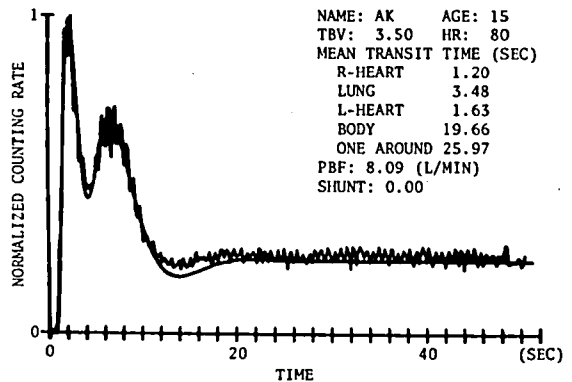
第 3.10 図 心放射図と出発値におけるモデルの計算例



第 3.11 図 周波数領域における心放射図の曲線あてはめ

12 図に示すように実測心放射図と非常によい一致を与える。

第 3.1 表に上例のパラメータ初期推定値，最終推定値，標準偏差および同一のデータを従来のアナログ計算機で処理した場合の推定値を示す。ここに標準偏差としたものは，評価関数 J の逆 Hessian の対角要素の平方根 (Bard, 1974) である。本アルゴリズムの推定値とアナログ計算機による結果は，標準偏差を考慮すればほぼ一致していると考えることができる。

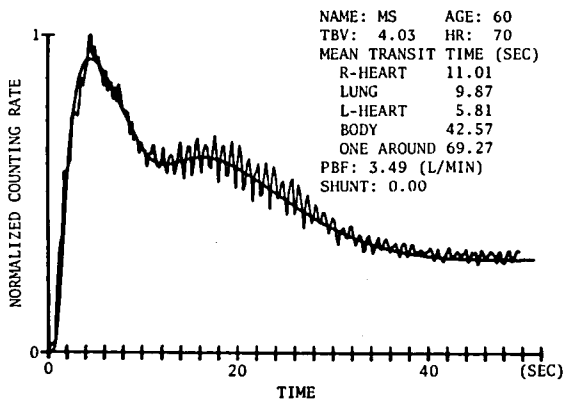


第 3.12 図 心放射図のシミュレーション(正常例)

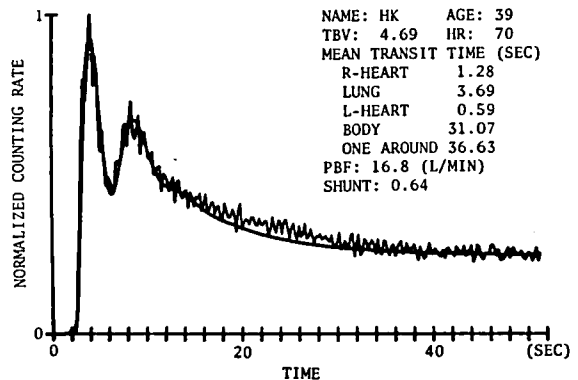
さらに右心不全の例を第 3.13 図に，心房中隔欠損の例を第 3.14 図に示す。これらの例について推定された心臓循環系各部の平均通過時間，短絡率などの値はアナログ計算機での処理結

第 3.1 表 パラメータの推定値の 1 例

	$1/T_r$	$1/T_p$	$1/T_l$	$1/T_b$	τ_p	τ_b	τ_i	γ
Initial Estimate	0.700	0.900	0.700	0.057	2.200	2.800	1.400	3.058
Estimated Value (By Digital Simulation)	0.835	0.779	0.614	0.059	2.200	2.800	1.632	4.321
Standard Deviation	0.056	0.114	0.082	—	—	—	0.121	0.991
Estimated Value (By Analog Simulation)	0.810	0.930	0.586	0.059	2.600	2.400	—	—



第 3.13 図 心放射図のシミュレーション (右心不全例)



第 3.14 図 心放射図のシミュレーション (心房中隔欠損例)

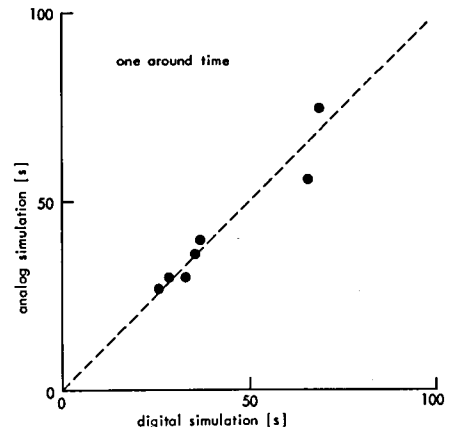
果とよい一致を示した。第 3.15 図は一巡平均通過時間を比較した 1 例で、症例は少ないが比較的よい相関を示している。

なお処理に使用したミニコンピュータは YH P 2100 A であり、処理時間は FORTRAN 言語を用いて約 5 分である。これは現用の高速アナログ計算機による処理時間と大差なく、実用上十分短時間であると考えられる。

3.4 ま と め

心拍出量をはじめとして心臓循環系に関する多くの有用な情報を測定できる心放射図シミュ

レーションの自動化を目的として、ミニコンピュータによる心放射図数学モデルのパラメータ推定アルゴリズムを開発した。これを線形むだ時間系パラメータの最小 2 乗推定問題と考えた場合、解決すべき点は処理時間の短縮と残差 2 乗和評価関数の数値計算法である。アルゴリズムにおいては、段階的にパラメータを推定する方法を採用し、推定法として周波数領域に窓を設けた最小 2 乗法、すなわち周波数窓法を考案してこれらの問題を解決した。この推定法では実測データおよび数学モデルのフーリエ変換後の主要成分だけに注目することによって、雑音の除去などの平滑化を含むデータの前処理と残差 2 乗和評価における計算量の減少を一挙に実現し、比較的短時間で解析結果を得ることを可能にした。推定された心臓循環系各部の平均通



第 3.15 図 デジタルおよびアナログシミュレーションによる一巡平均通過時間の比較

過時間、心拍出量および左心から右心への短絡率などは、従来のアナログ計算機での処理結果とよい一致を示した。なおこの方法がシンチレーションカメラのみならず、従来からの動態機能測定に用いられる装置で計測された心放射図データに対しても、全く同様に適用できることは言うまでもない。

これらの点から考えると、このアルゴリズムは処理時間ならびに信頼性の点で臨床検査用として十分実用に耐えるということができよう。

第4章 パラメータ推定の一意性と安定度

4.1 はじめに

システムの解析やシミュレーションに際して、パラメータで特徴づけられた数学モデルを仮想し、与えられた観測データからこれらのパラメータを推定してシステムを同定する手法は、コンパートメントアナリシスなど生体工学的な分野ではよく利用されるものである。

このようなパラメータ推定問題の一般的な解法は、モデルの計算値ないし理論値と、実際の観測値との残差に関する適当な評価関数を作成し、これを最小にするパラメータ値を見出して、その値を推定値とするものである。

この種の解法の理論的な検討にあたっては、観測データに何らかの統計的性質を仮定して確率論的に取扱ったり、評価関数の極値近傍での形状から近似的な分散を推定したりすることが多い (Bard, 1974)。いずれにしても評価関数のある定義域での凸性 (コワリック, 1968) すなわち単峰性が仮定されている。実際には評価関数が多峰性になることがあるが、このような問題に関しては、各極値の具体的な探索法 (久保田, 1974; Törn, 1977) の他はあまり論じられていない。

本章では、ある限られたクラスのパラメータ推定問題についての幾何学的解釈を試み、その若干の性質について考察する。まず簡単な例を挙げて問題点を指摘する。

数学モデルとして

$$x = \exp(-pt) \quad (4.1)$$

が与えられ、観測データとして、 $t = t_{(1)} = 0.1$ で X^1 , $t = t_{(2)} = 0.3$ で X^2 が得られたとする。ここに右肩の数字は単なる指標である。今、このデータ (X^1, X^2) からパラメータ p を推定することを考える。

まず評価関数を

$$(J)^2 = [X^1 - \exp(-0.1p)]^2 + [X^2 - \exp(-0.3p)]^2 \quad (4.2)$$

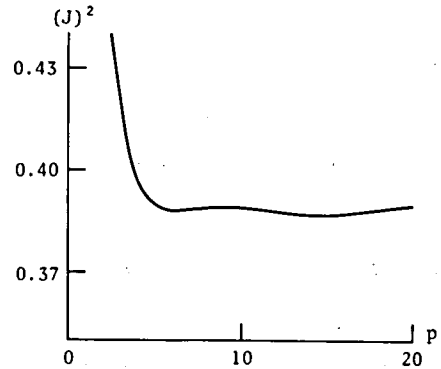
とし、いわゆる最小2乗推定をする。

$$\left. \begin{array}{l} X^1 = 0.1300 \\ X^2 = 0.6265 \end{array} \right\} \quad (4.3)$$

の場合に p に関して $(J)^2$ を計算してグラフにすれば第 4.1 図となる。すなわち、2つの極小値が現われ、試行錯誤的な極値探索法を $(J)^2$ の最小化に用いるとすれば、出発点の選び方によって推定値が相異なることになる。またこの問題の枠組だけからでは、どちらの極小値を p の推定値とするかは決定困難である。

次に、同一のデータに対して、評価関数を

$$\begin{aligned} (J')^2 = & \frac{[X^1 - \exp(-0.1p)]^2}{[\exp(-0.1p)]^2} \\ & + \frac{[X^2 - \exp(-0.3p)]^2}{[\exp(-0.3p)]^2} \end{aligned} \quad (4.4)$$



第 4.1 図 $(J)^2$ の計算例 (1)

とすれば、第 4.2 図のグラフが得られる。同じモデルとデータを使ったにもかかわらず、この場合には p を一意的に決定することができる。

さらに、モデルとデータの対数を取り、評価関数を

$$\begin{aligned} (J'')^2 = & \{ \ln X^1 - \ln [\exp(-0.1p)] \}^2 \\ & + \{ \ln X^2 - \ln [\exp(-0.3p)] \}^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

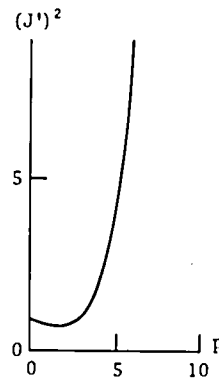
とすると第 4.3 図が得られる。評価関数 $(J'')^2$ は p の 2 次関数であって単峰性である。この場合は、線形モデル：

$$y = -pt \quad (4.6)$$

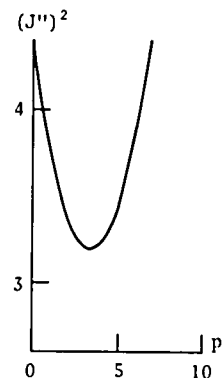
を、 $t = 0.1$ と $t = 0.3$ でそれぞれ

$$\left. \begin{array}{l} Y^1 = \ln X^1 = -2.0402 \\ Y^2 = \ln X^2 = -0.4676 \end{array} \right\} \quad (4.7)$$

のデータに最小 2 乗法であてはめたと解



第 4.2 図 $(J')^2$ の計算例



第 4.3 図 $(J'')^2$ の計算例

積することもできる。

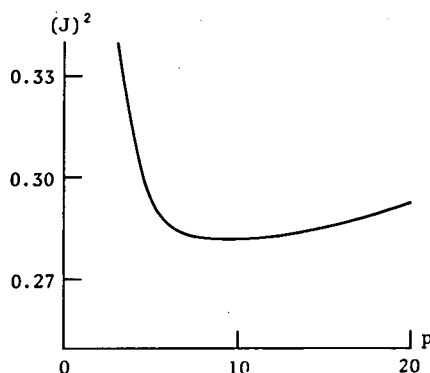
第(4.1)式のモデルと第(4.2)式の評価関数に対し、今度は観測データが第(4.3)式から若干変動して、

$$\left. \begin{array}{l} X^1 = 0.1700 \\ X^2 = 0.5431 \end{array} \right\} \quad (4.8)$$

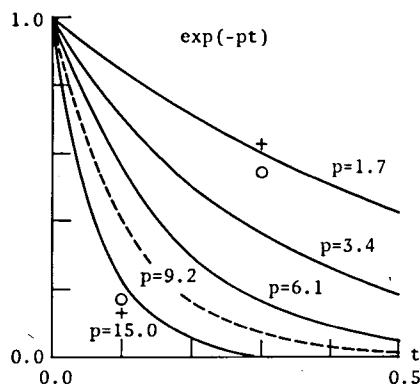
である場合について考える。この場合の評価関数を計算した結果を第4.4図に示す。図から明らかなように、 $(J)^2$ は単峰性であり、推定値は一意的に決定できる。すなわち、比較的小さなデータの変動によっても、評価関数の性質は双峰性から単峰性へと変わり、パラメータの推定値が大きく変化する可能性があることがわかる。

上述のそれぞれの場合に得られた推定値におけるモデルの計算値を第4.5図に示す。図中、+印は第(4.3)式のデータを、また○印は第(4.8)式のデータを意味し、また破線は○印に対する結果を表わしている。

ここに挙げた例は比較的極端な場合であるが、一般にモデルとデータと評価関数の組合せによって、パラメータ推定値はさまざまに変化するものである。以下ではこのようなパラメータ推定問題の構造を幾何学的にとらえ、データにかかわらずパラメータを一意的に定めることができるための条件、すなわち単峰性の判定条件を考察する。さらにデータの変動によって推定値が不連続的に変化する理由と、そうならないための条件についても検討し、パラメータ推定値の安定度の概念を提案する。



第4.4図 $(J)^2$ の計算例(2)



第4.5図 パラメータ推定結果の比較

4.2 パラメータ推定問題の幾何学的解釈と一意性に関する条件

まず対象とするパラメータ推定問題を定式化する。

独立変数 t (たとえば時間) および M 個の互に独立なパラメータ p^i ($i = 1, 2, \dots, M$) の関数として次式のような数学モデルが与えられている。

$$x(t) = x(t, p^i) \quad (4.9)$$

ここに、 $x(t, p^i)$ は t および p^i について必要なだけ連続微分可能とする。一方観測値 (以下データ) は N 個の時点 $t_{(\kappa)}$ ($\kappa = 1, 2, \dots, N$) で得られているとし、これらをまとめて X^κ と記す。また、

$$N \gg M \quad (4.10)$$

と仮定する。同様に、 $t_{(\kappa)}$ 時点におけるモデルの計算値をまとめて

$$x_{(p)}^\kappa = x(t_{(\kappa)}, p^i) \quad (4.11)$$

と書くことにする。ただし、 $x_{(p)}^\kappa$ の p^i に関する関数行列の階数は

$$\text{rank} \left(\frac{\partial x_{(p)}^\kappa}{\partial p^i} \right) = M \quad (4.12)$$

と仮定する。

今、データの作る N 次元空間で X^κ と $x_{(p)}^\kappa$ を結ぶ 1 つの曲線 C

$$C : x^\kappa = x^\kappa(\tau), \quad \tau_1 \leq \tau \leq \tau_2 \quad (4.13)$$

$$\text{ただし, } x_{(p)}^\kappa = x^\kappa(\tau_1)$$

$$X^\kappa = x^\kappa(\tau_2)$$

をとり、次式のような積分 J を考える。

$$J = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \sqrt{\sum_{\kappa=1}^N \sum_{\mu=1}^N g_{\kappa\mu} \frac{dx^\kappa}{d\tau} \frac{dx^\mu}{d\tau}} d\tau \quad (4.14)$$

ここに、 $g_{\kappa\mu}$ は x^κ に関して必要なだけ連続微分可能な正定値関数行列であり、また C は J の値を最小にする積分路であるとする。この曲線 C はいわゆる測地線に相当する。

第 (4.14) 式の積分の値の 2 乗を評価関数 $(J)^2$ とし、 $(J)^2$ を極小にするような p^i の値をパラメータの推定値とする。

以下では、式の各項中に上下に同じ指標が繰返されていれば、これはその指標に関する総和

を意味する、いわゆるアインシュタインの規約を用いることとし、さらに指標は i, j, k, \dots 等の場合には 1 から M までまた $\kappa, \mu, \lambda, \dots$ 等では 1 から N まで流れるものとする。

特に第 (4.14) 式において

$$g_{\kappa\mu} = \delta_{\kappa\mu} = \begin{cases} 1, & \kappa = \mu \\ 0, & \kappa \neq \mu \end{cases} \quad (4.15)$$

とすれば、測地線 C は X^κ と $x_{(p)}^\kappa$ を結ぶ直線となり、

$$(J)^2 = \delta_{\kappa\mu} (X^\kappa - x_{(p)}^\kappa) (X^\mu - x_{(p)}^\mu) = \sum_{\kappa=1}^N (X^\kappa - x_{(p)}^\kappa)^2 \quad (4.16)$$

となる。これは普通の最小 2 乗法の評価関数である。

このような評価関数が与えられた際、この被積分項の係数行列 $g_{\kappa\mu}$ を基本共変テンソルとみなせば、全ての N 重組データの作る空間はリーマン空間であると考えることができる。すなわち、座標が x^κ と $x^\kappa + dx^\kappa$ である 2 点間の無限小距離 ds が

$$(ds)^2 = g_{\kappa\mu} dx^\kappa dx^\mu \quad (4.17)$$

で与えられ、また X^κ と $x_{(p)}^\kappa$ の間の距離が J であるような空間である。この計量 $g_{\kappa\mu}$ をもったデータの作るリーマン空間を、以後データ空間 V_N と呼ぶことにする。

同様にして、第 (4.11) 式はデータ空間内で M 個のパラメータ p^i で媒介変数表示された M 次元リーマン多様体を表わすことになる。今後これをモデル多様体 V_M と呼ぶことにする。

このようにすると、パラメータ推定問題はリーマン幾何学 (池田峰夫, 1975; Sokolnikoff, 1951; 立花, 1971; 矢野, 1971) の範疇で取扱うことができる。すなわち、 $g_{\kappa\mu}$ という基本共変テンソルを有するリーマン空間 V_N 内で、1 点 X^κ から p^i で媒介変数表示された M 次元多様体 V_M への最短距離を与える V_M 上の点 $x_{(p)}^\kappa$ を見付ける問題と考えることができる。

たとえば、第 4.1 節の最初の例について V_N, V_M 等を図示すれば第 4.6 図のようになる。

次に、与えられたモデルと評価関数からパラメータを一意的に推定できるかどうかを検討する。議論を簡単にするためにデータ空間は平坦であると仮定する。式で表現すれば、

$$R_{\nu\mu\lambda}{}^\kappa = 0 \quad (4.18)$$

となる。ここに $R_{\nu\mu\lambda}{}^\kappa$ はリーマン・クリストッフェルのテンソルで

$$R_{\nu\mu\lambda}{}^\kappa = \frac{\partial \{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu\lambda \end{smallmatrix} \}}{\partial x^\nu} - \frac{\partial \{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \nu\lambda \end{smallmatrix} \}}{\partial x^\mu} + \{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \nu\alpha \end{smallmatrix} \} \{ \begin{smallmatrix} \alpha \\ \mu\lambda \end{smallmatrix} \} - \{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu\alpha \end{smallmatrix} \} \{ \begin{smallmatrix} \alpha \\ \nu\lambda \end{smallmatrix} \} \quad (4.19)$$

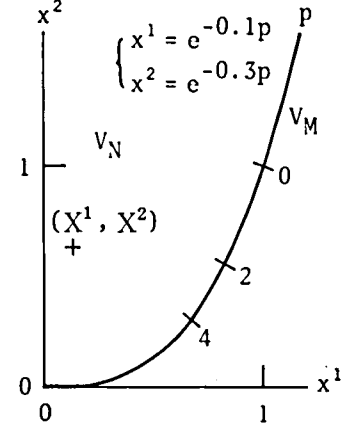
$$\{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu \lambda \end{smallmatrix} \} = \frac{1}{2} g^{\kappa\omega} \left(\frac{\partial g_{\lambda\omega}}{\partial x^\mu} + \frac{\partial g_{\mu\omega}}{\partial x^\lambda} - \frac{\partial g_{\mu\lambda}}{\partial x^\omega} \right)$$

である。ただし $\{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu \lambda \end{smallmatrix} \}$ はクリストッフェルの記号であり、 $g^{\lambda\kappa}$ は基本反変テンソルである。

$$g_{\mu\lambda} g^{\lambda\kappa} = \delta_\mu^\kappa \quad (4.20)$$

言いかえると、 $g_{\kappa'\mu'}$ が定数となるような適当な座標変換：

$$x^{\kappa'} = x^{\kappa'}(x^\kappa), \quad \left| \frac{\partial x^{\kappa'}}{\partial x^\kappa} \right| \neq 0 \quad (4.21)$$



第 4.6 図 幾何学的解釈の 1 例

の存在を仮定したことになる。

直観的に考えれば、このようなデータ空間内でモデル多様体が平坦であれば、任意のデータ X^κ に対して、 X^κ と V_M との距離は p^i に関する凸関数となり唯一の極小値が存在することがわかる。そこで、モデル多様体がデータ空間内で平坦であるための条件を求める。

モデル多様体 V_M 上の 1 点は V_M の座標系では成分 p^i で、またデータ空間 V_N の座標系では成分 $x_{(p)}^\kappa$ で表わされる。 $x_{(p)}^\kappa$ の p^i に関する偏微分で作った関数行列を

$$B_i^\kappa = \frac{\partial x_{(p)}^\kappa}{\partial p^i} \quad (4.22)$$

と書く。この行列の階数は仮定によって M である。 B_i^κ は V_N のベクトルとみなせば、 V_M に $x_{(p)}^\kappa$ で接している M 個の接ベクトルを意味している。この B_i^κ を用いると V_M の基本共変テンソル g_{ij} は

$$g_{ij} = B_i^\kappa B_j^\mu g_{\kappa\mu} \quad (4.23)$$

で計算される。

次に B_i^κ の V_M に沿った共変微分係数を計算すると、

$$B_{i,j}^\kappa = \frac{\partial B_i^\kappa}{\partial p^j} + \{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu \lambda \end{smallmatrix} \} B_i^\mu B_j^\lambda - \{ \begin{smallmatrix} h \\ i j \end{smallmatrix} \} B_h^\kappa \quad (4.24)$$

となる。ただし、 $\{ \begin{smallmatrix} \kappa \\ \mu \lambda \end{smallmatrix} \}$ は共変微分を意味し、また

$$\{ \begin{smallmatrix} h \\ i j \end{smallmatrix} \} = \frac{1}{2} g^{ha} \left(\frac{\partial g_{ia}}{\partial p^j} + \frac{\partial g_{ja}}{\partial p^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial p^a} \right) \quad (4.25)$$

である。このテンソルは B_i^κ に垂直で V_M の曲率を表わし、

$$H_{ij}^\kappa = B_{i,j}^\kappa \quad (4.26)$$

と記して、オイラー・スカウテンの曲率テンソルと呼ばれる。

H_{ij}^κ の全成分が零であるような V_M は全測地曲面であり、これは p^i が変化しても B_i^κ は不変であることを意味している。すなわち V_M は平坦である。上述の議論をまとめ、若干表現をかえると次の命題を得る。

〔命題〕

データ空間 V_N は平坦、モデル多様体 V_M は

$$x_{(p)}^\kappa = x^\kappa(p^i) \quad (4.27)$$

で表わされている。このとき任意のデータ X^κ と V_M 上の点 $x_{(p)}^\kappa$ に関する評価関数

$$(J)^2 = \left\{ \int_C \sqrt{g_{\kappa\mu} \frac{\partial x^\kappa}{\partial \tau} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tau}} d\tau \right\}^2 \quad (4.28)$$

が、 p^i に関して定係数正値 2 次形式になるような V_M の 1 対 1 連続な座標変換が存在する条件は、オイラー・スカウテンの曲率テンソル H_{ij}^κ が恒等的に零になることである。ただし C は X^κ と $x_{(p)}^\kappa$ を結ぶ測地線である。

証明： V_N は平坦だから、 $g_{\kappa\mu}$ は定数で $\{ \mu^\kappa{}_\lambda \} = 0$ であると仮定して一般性を失わない。したがって第 (4.28) 式は

$$(J)^2 = g_{\kappa\mu} (X^\kappa - x_{(p)}^\kappa) (X^\mu - x_{(p)}^\mu) \quad (4.29)$$

となる。今上式を $p^i = 0$ を原点として p^i に関して展開すれば、

$$\begin{aligned} (J)^2 &= g_{\kappa\mu} X^\kappa X^\mu - 2g_{\kappa\mu} X^\kappa B_j^\mu p^j \\ &\quad + g_{\kappa\mu} (B_i^\kappa B_j^\mu - 2X^\kappa \frac{\partial B_i^\mu}{\partial p^j}) p^i p^j + \dots \end{aligned} \quad (4.30)$$

であるから、 X^k にかかわらず $(J)^2$ が定係数正値2次形式となることは B_i^k が定数になることと等価である。

必要性： B_i^k が定数ならば、 g_{ij} は定数となり $\{i^h_j\} = 0$ である。また $\partial B_i^k / \partial p^j = 0$ したがって第(4.24)式より $H_{ij}^k = 0$ が得られる。

十分性： $H_{ij}^k = 0$ ならばガウスの方程式

$$R_{ijk}^l = R_{\nu\mu\lambda}^k B_i^\nu B_j^\mu B_k^\lambda B_\kappa^l + H_{i\kappa}^l H_{jk}^k - H_{j\kappa}^l H_{ik}^k \quad (4.31)$$

より V_M は平坦である。したがって $\{i^h_j\}' = 0$ となるような V_M の座標系

$$p^{i'} = p^{i'}(p^i)$$

が存在する。また、 $H_{ij}^k = 0$ は座標系によらないから $H_{i'j'}^k = 0$ である。ゆえに $\partial B_{i'}^k / \partial p^{j'} = 0$ を得る。すなわち、このような座標系においては $B_{i'}^k$ は定数である。〔証明終〕

命題の条件が満足されていれば、パラメータに適当な変換を施して評価関数を定係数正値2次形式にすることができる。この関数は唯一の極小値をもつからパラメータを一意的に決定できることは明らかである。逆に、 $H_{ij}^k \neq 0$ の場合には、次節でみるように、 V_M の1点における法曲率の1成分に対応する曲率半径より遠方にデータ X^k を与えることにより、評価関数を多峰性にすることが可能である。したがって、 H_{ij}^k を評価することによってパラメータ推定の一意性を判別することができる。

以下に、 $N=2$ 、 $M=1$ の場合の簡単な計算例を示す。

モデルが

$$x(t) = \exp(-pt)$$

で与えられ、データは $t = t_{(1)} = r$ および、 $t = t_{(2)} = q$ の2時点でそれぞれ X^1 、 X^2 が得られるとする。この場合、 V_M は

$$\left. \begin{aligned} x_{(p)}^1 &= \exp(-rp) \\ x_{(p)}^2 &= \exp(-qp) \end{aligned} \right\} \quad (4.32)$$

と表現できる。評価関数 $(J)^2$ を

$$(J)^2 = (X^1 - x_{(p)}^1)^2 + (X^2 - x_{(p)}^2)^2 \quad (4.33)$$

とすれば、 V_N の基本共変テンソル $g_{\kappa\mu}$ は、

$$g_{11} = g_{22} = 1, \quad g_{12} = g_{21} = 0 \quad (4.34)$$

となる。したがってオイラー・スカウテンの曲率テンソルは、

$$\left. \begin{aligned} H_{11}^1 &= \frac{rq^2(r-q) \exp[-(r+2q)p]}{r^2 \exp(-2rp) + q^2 \exp(-2qp)} \\ H_{11}^2 &= \frac{-r^2 q(r-q) \exp[-(2r+q)p]}{r^2 \exp(-2rp) + q^2 \exp(-2qp)} \end{aligned} \right\} \quad (4.35)$$

となり、一般には零とはならない。すなわちこの例では推定値を一意的に決定できないようなデータが存在することになる。第(4.3)式のデータがその1例である。

次に同じモデルで評価関数 $(J')^2$ を

$$(J')^2 = \left[\int_c \sqrt{\frac{1}{(x^1)^2} \frac{dx^1}{d\tau} \frac{dx^1}{d\tau} + \frac{1}{(x^2)^2} \frac{dx^2}{d\tau} \frac{dx^2}{d\tau}} d\tau \right]^2 \quad (4.36)$$

とした場合を計算する。上式はモデル多様体の近傍では第4.1節の第(4.4)式に一致する。

まず基本共変テンソル $g_{\kappa\mu}$ は

$$g_{11} = \frac{1}{(x^1)^2}, \quad g_{22} = \frac{1}{(x^2)^2}, \quad g_{12} = g_{21} = 0 \quad (4.37)$$

となる。クリストッフェルの記号を計算すると

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 11 \end{smallmatrix} \right\} &= -\frac{1}{x^1}, & \left\{ \begin{smallmatrix} 2 \\ 22 \end{smallmatrix} \right\} &= -\frac{1}{x^2} \\ \left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 21 \end{smallmatrix} \right\} &= \left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 22 \end{smallmatrix} \right\} = \left\{ \begin{smallmatrix} 2 \\ 11 \end{smallmatrix} \right\} = \left\{ \begin{smallmatrix} 2 \\ 21 \end{smallmatrix} \right\} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.38)$$

と求まる。一方 V_M の基本共変テンソル g_{ij} は、

$$g_{11} = r^2 + q^2 \quad (4.39)$$

となり、したがって V_M のクリストッフェルの記号は零である。ゆえに第(4.24)式より、

$$H_{11}^1 = \frac{\partial B_1^1}{\partial p} + \left\{ \begin{smallmatrix} 1 \\ 11 \end{smallmatrix} \right\} B_1^1 B_1^1 = 0 \quad \left. \vphantom{\frac{\partial B_1^1}{\partial p}} \right\}$$

$$H_{11}^2 = \frac{\partial B_1^2}{\partial p} + \left\{ \begin{matrix} 2 \\ 22 \end{matrix} \right\} B_1^2 B_1^2 = 0 \quad \} \quad (4.40)$$

が得られる。すなわち $(J')^2$ を用いればパラメータを一意的に推定することができる。

また、第 4.1 節の第 (4.5), (4.6) 両式のように、 V_N に直交直線座標系を用い、モデルが線形の場合には B_i^κ は定数となり、明らかにオイラー・スカウテンの曲率テンソルは零である。

4.3 パラメータ推定値の安定度

本節では評価関数が

$$(J)^2 = \delta_{\kappa\mu} (X^\kappa - x_{(p)}^\kappa) (X^\mu - x_{(p)}^\mu) \quad (4.41)$$

である場合に話を限ることとする。すなわちデータ空間 V_N は平坦で、直交直線座標系が設定されていると仮定する。

さて、 $(J)^2$ を極小にする点 p^i が得られたとすると、そのときデータ X^κ は p^i におけるモデル多様体 V_M に垂直な法空間内にあることになる。ここで、 X^κ が微小距離変動して $X^\kappa + dX^\kappa$ になったとする。 dX^κ は V_M の接空間の成分とそれに直交し補空間をなす法空間の成分に分解することができる。接空間は B_i^κ によって張られているから、 V_M の基本共変テンソル g_{ij} から基本反変テンソル g^{ij} を作り、

$$B_i^\kappa = g^{ij} \delta_{\kappa\mu} B_j^\mu \quad (4.42)$$

とすることにより、 dX^κ の接空間への射影が次のように計算できる。

$$dp^i = B_i^\kappa dX^\kappa \quad (4.43)$$

すなわち、データが変動した場合のパラメータ推定値の変化が得られる。

今、特に $dp^i = 0$ となるような dX^κ だけに注目する。すなわち dX^κ は法空間のベクトルであると仮定する。もしも V_M が平坦であれば dX^κ がこの法空間内を動くかぎり推定値は不変である。しかし V_M が平坦でなく、データが V_M の p^i における 1 つの曲率中心を越えて変動した場合には、今まで $(J)^2$ の極小点であった p^i は突然極大点に変貌し、推定値は大きく変化することになる。このような法空間内のデータの連続的な変動によって推定値が不連続的に変化する場合を、便宜上、その推定値は不安定であると呼ぶことにする。また少々データの變動では

不安定にならない場合に、その推定値は安定度が大きい、逆の場合を安定度が小さいと言うことにする。以下ではこの安定度の目安となる量を求める。

一般に $x_{(p)}^{\kappa}$ で V_M に垂直かつ互に直交する単位ベクトル B_P^{κ} は $(N-M)$ 個ある ($P=M+1, \dots, N$)。オイラー・スカウテンの曲率テンソルは V_M に垂直であるから、これを B_P^{κ} の 1 次結合として表現すれば、

$$H_{ij}^{\kappa} = \sum_{P=M+1}^N H_{ijP} B_P^{\kappa} \quad (4.44)$$

となる。ここに係数 H_{ijP} は

$$H_{ijP} = \delta_{\kappa\mu} H_{ij}^{\kappa} B_P^{\mu} \quad (4.45)$$

で計算できる。 $x_{(p)}^{\kappa}$ と X^{κ} を結ぶ方向の単位法線を特に

$$B_Q^{\kappa} = \frac{(X^{\kappa} - x_{(p)}^{\kappa})}{\sqrt{\sum_{\mu=1}^N (X^{\mu} - x_{(p)}^{\mu})^2}} \quad (4.46)$$

とすると、 V_M の p^i における B_Q^{κ} に関する M 個の主曲率 Λ_Q と主曲率方向 h^i は次式から求められる。

$$(H_{ijQ} - \Lambda_Q g_{ij}) h^i = 0 \quad (4.47)$$

ここに

$$H_{ijQ} = \delta_{\kappa\mu} H_{ij}^{\kappa} B_Q^{\mu} \quad (4.48)$$

であり、 Λ_Q は

$$|H_{ijQ} - \Lambda_Q g_{ij}| = 0 \quad (4.49)$$

の解でなければならない。ただし、 $g^{ik} H_{kjQ}$ は正則行列とする。

$x_{(p)}^{\kappa}$ と X^{κ} との距離が、 M 個の Λ_Q に対応する各曲率半径より十分小さければ、データの小さな変動 dX^{κ} で $X^{\kappa} + dX^{\kappa}$ が曲率半径をとび出す可能性は少ない。すなわち安定度が大きいことになる。

上述の議論から安定度 S を次のように定義すれば便利であることがわかる。

〔定義〕

モデル計算値とデータの残差 2 乗和を評価関数 $(J)^2$ とするパラメータ推定問題において、次式の S を推定値の安定度と定義する。

$$S = \min_{A_Q} \left| \frac{1}{A_Q} - \sqrt{(J)^2} \right| \quad (4.50)$$

ここに、 A_Q は推定値 $p^i(x_p^k)$ とデータ X^k を結ぶ方向の単位ベクトル B_Q^k に関するモデル多様体 V_M の p^i における M 個の主曲率である。

S は曲率中心と X^k との距離を表わす。言い換えれば、 B_Q^k 方向に S だけデータを動かせば p^i は極小点ではなくなり推定値は別の点に移動することになる。

1例として第(4.32)式のモデルと第(4.33)式の評価関数について、 A_Q を計算すれば次のようになる。

$$A_Q = \left[\frac{(X^1 - e^{-rp})rq^2(r-q)e^{-(r+2q)p} + (X^2 - e^{-qp})r^2q(q-r)e^{-(2r+q)p}}{\sqrt{(X^1 - e^{-rp})^2 + (X^2 - e^{-qp})^2(r^2e^{-2rp} + q^2e^{-2qp})^2}} \right] \quad (4.51)$$

第4.1節の例のように $r = 0.1$, $q = 0.3$ とし、データが第(4.8)式で与えられた場合には、推定値は $p = 9.1629$, 評価関数は $(J)^2 = 0.2824$ となり、安定度 S は $S = 0.0373$ と計算される。したがってデータの変動距離 $\sqrt{\delta_{\kappa\mu} dX^{\kappa} dX^{\mu}}$ が S 程度以上であれば、推定値が不安定になる可能性があることがわかる。ちなみに第(4.3)式と第(4.8)式の両データの距離 $|dX^k|$ を計算すれば、 $|dX^k| = 0.0925$ となって S の大略3倍である。事実第4.1図と第4.4図に示すとうりデータのこの変動によって推定値は大きく変化している。

4.4 ま と め

パラメータ推定あるいは曲線あてはめの問題は、評価関数をデータ空間の距離関数とみなすことによってリーマン空間の幾何学的な問題として直観的に理解できる場合のあることを明らかにした。そして、データにかかわらず数学モデルのパラメータを一意的に決定するための条件を導き、さらに曲率半径の概念を利用してパラメータ推定値のデータ変動に対する安定度の考え方を提案した。これにより、パラメータ推定における評価関数の多峰性に関する見通しのよい議論が可能になったと言える。

第5章 数値逆ラプラス変換の誤差に関する1考察

5.1 はじめに

ラプラス変換の s 関数が与えられて、この逆変換を数値的に求める必要にせまられる事態は、日常よく経験することである。

逆ラプラス変換の数値計算法の1つに第3章で用いた高速フーリエ変換(FFT)を利用する市川らの方法(Ichikawa, 1975)がある。この計算法は計算時間が比較的短かく、第3章の数学モデルのようにむだ時間などを含んだ複雑な s 関数の時間領域解を数値的に得る目的には非常に便利なものである。

本章では、この計算法に対する誤差解析の端緒として、最も簡単な s 関数、すなわち1次おくれのインパルス応答について1つの誤差評価を導き、計算誤差生成要因理解の一助とする。

いま、 $F(s)$ が与えられて $f(t)$ を数値的に求めるために、逆変換の定義式

$$f(t) = \frac{1}{2\pi j} \int_{a-j\infty}^{a+j\infty} F(s) e^{st} ds \quad (5.1)$$

を直接数値積分することを考える。

$$s = a + j\omega$$

として第(5.1)式に代入すると

$$f(t) = \frac{e^{at}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(a + j\omega) e^{j\omega t} d\omega \quad (5.2)$$

が得られる。求める数値解の時間区間を $[0, T]$ として、第(5.2)式の右辺を無限級数で近似すれば、

$$\begin{aligned} f(t) + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-anT} f(t + nT) \\ = \frac{e^{at}}{T} \sum_{k=-\infty}^{\infty} F\left(a + j\frac{2k\pi}{T}\right) e^{\frac{j2k\pi}{T}t} \quad (5.3) \\ (0 \leq t < T) \end{aligned}$$

となる。ここに $2\pi/T$ は角周波数刻みであり、また左辺第2項は誤差項である。

実際には第(5.3)式右辺の総和は、ある正整数K項までで打ち切った有限項の総和として計算しなければならない。このKを固定した場合、数値逆ラプラス変換 $f(t)$ の計算に当っては、その誤差が t によってどのように変化するかを評価しておくことが必要である。

第(5.3)式右辺の総和が近似的にしか得られないとすると、右辺全体の誤差は $\exp(at)$ に比例する。他方左辺の誤差項は係数に $\exp(-aT)$ があるために、 a が大きいほど誤差は小さいことになる。すなわち、積分路 a の値には最適点あるいは妥協点があると考えられる。従来この値は経験的に $aT/2 = 3 \sim 5$ 程度 (Silverberg, 1970) の比較的小さな値がよいとされている。 a をもっと大きく選んではなぜ悪いのかという点についても若干の検討をくわえる。

5.2 FFT を用いた逆変換の数値計算法

逆ラプラス変換の数値計算法は次のようにして実行される。すなわち、 $f(t)$ を実関数と仮定し、第(5.2)式の積分区間を上限 W で打ち切り、さらに K 等分して台形公式で数値積分すれば

$$f(t) \simeq \frac{e^{at} \Delta\omega}{2\pi} \{ R(0) + 2R(\Delta\omega) + \dots + R(K\Delta\omega) \} \quad (5.4)$$

となる。ただし

$$R(\omega) = \operatorname{Re} \{ F(a + j\omega) e^{j\omega t} \}$$

であり、また $\Delta\omega$ は角周波数刻みである。

$f(t)$ の値を $t=0$ から、時間刻み

$$\Delta t = T/K$$

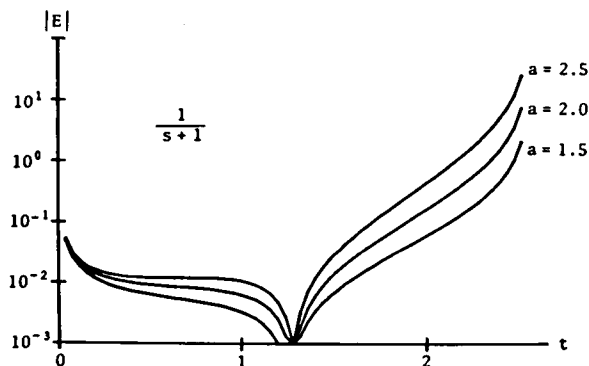
毎に等間隔で K 個求めるとすると

$$f(t_n) \simeq \frac{2e^{at_n}}{T} \left[\operatorname{Re} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} F\left(a + j\frac{2k\pi}{T}\right) e^{\frac{j2nk\pi}{K}} \right\} - \frac{1}{2} F(a) + \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ F\left(a + j\frac{2K\pi}{T}\right) \right\} \right] \quad (5.5)$$

となる。ここに、 $\Delta\omega = 2\pi/T$, $t_n = n\Delta t = 2n\pi/W$ ($n=0, \dots, K-1$) である。

K を 2 のべき乗に選べば、第(5.5)式右辺第1項の総和には高速フーリエ変換が適用できて、

K 個の時刻における $f(t_n)$ の値を一挙に計算することができる。



第 5.1 図 $1/(s+1)$ の誤差変化

第 5.1 図に

$$F(s) = 1/(s+1) \quad (5.6)$$

とした場合の計算誤差の 1 例を示す。横軸は時間軸、縦軸は誤差の対数表示である。 $\Delta t = 0.04$ [秒] , $K = 64$ とし、積分路 a の値は上から順に 2.5, 2.0, 1.5 として計算した。誤差は時間軸の両端で大きく、また a によっても変化することがわかる。

5.3 誤差解析

計算機のまるめ誤差を無視すると、上述の計算法における誤差は、第 (5.2) 式中の無限積分の有限定積分化とその定積分の台形公式による近似の 2 つが原因と考えられる。便宜上、ここでは前者を積分誤差、後者を台形誤差と呼ぶことにする。

以下では最も簡単な 1 次おくれのインパルス応答

$$F(s) = 1/(s-b) \quad (5.7)$$

について両誤差の評価式を導く、ただし $s = a + j\omega$, $a, \omega, b \in \text{Real}$, $a > b$ とする。

5.3.1 積分誤差

第 (5.7) 式の逆変換は

$$f(t) = \frac{e^{at}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{(a-b) \cos \omega t + \omega \sin \omega t}{(a-b)^2 + \omega^2} d\omega \quad (5.8)$$

である。積分区間の上限をWで打ち切れれば、

$$f(t) \simeq \frac{e^{at}}{\pi} \int_0^W \frac{(a-b) \cos \omega t + \omega \sin \omega t}{(a-b)^2 + \omega^2} d\omega \quad (5.9)$$

となる。この結果生じた積分自体の誤差 I_1 を評価するために、正弦波と余弦波の部分に分割して書けば

$$I_1 = I_{1c} + I_{1s} \quad (5.10)$$

ただし

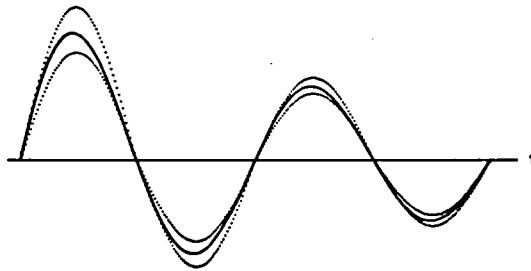
$$I_{1c} = \int_W^{\infty} \frac{(a-b) \cos \omega t}{(a-b)^2 + \omega^2} d\omega \quad (5.11)$$

$$I_{1s} = \int_W^{\infty} \frac{\omega \sin \omega t}{(a-b)^2 + \omega^2} d\omega \quad (5.12)$$

となる。

$W > (a-b)$ と仮定すれば、 I_{1c} と I_{1s} の被積分関数の包絡線は ω に関して単調減少である。したがって I_{1c} と I_{1s} の被積分関数は、零点が同じでその零点における包絡線と同じ振幅を有する、段階的に一定振幅の正弦または余弦波で上下からおさえることができる。

1 例として I_{1s} の被積分関数の一部を第 5.2 図に示す。実線は $\omega \sin \omega t / \{(a-b)^2 + \omega^2\}$ を示し、両側の点線は各零点 ω_k を中心に 1 周期の間、 $\omega_k / \{(a-b)^2 + \omega_k^2\}$ の一定振幅を持つ



第 5.2 図 I_{1s} の評価法

正弦波である。上側の点線を連ねた関数の積分を求めれば I_{1s} の上限が、また下側を連ねたものからは下限が推定できる。

I_{1c} についても同様に考えると結局次式の評価が得られる。

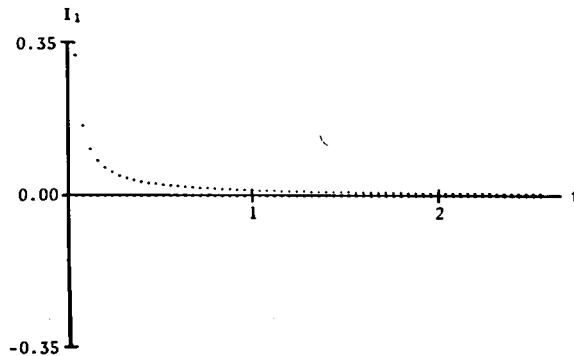
$$\begin{aligned} & \frac{(a-b)(-1-\sin W t_n)}{t_n \left\{ (a-b)^2 + \left(\frac{4n+1}{2t_n} \pi \right)^2 \right\}} + \frac{(4n+2)\pi(-1+\cos W t_n)}{2t_n^2 \left\{ (a-b)^2 + \left(\frac{4n+2}{2t_n} \pi \right)^2 \right\}} \\ & \leq (I_{1c} + I_{1s}) < \\ & \frac{(a-b)(1-\sin W t_n)}{t_n \left\{ (a-b)^2 + \left(\frac{4n-1}{2t_n} \pi \right)^2 \right\}} + \frac{4n\pi(1+\cos W t_n)}{2t_n^2 \left\{ (a-b)^2 + \left(\frac{4n}{2t_n} \pi \right)^2 \right\}} \end{aligned} \quad (5.13)$$

ただし、 $4n\pi \leq 2Wt_n < (4n+1)\pi$ とする。 $t_n = 2n\pi/W$ であることを考慮すれば、第(5.13)式の上限は大略

$$I_1 \simeq \frac{a-b+2W}{t_n \left\{ (a-b)^2 + W^2 \right\}} \quad (5.14)$$

となる。したがって、他のパラメータを一定とすれば、 $|I_1|$ ，すなわち積分区間の打ち切りによる誤差は大略 t に反比例することがわかる。

第(5.13)式の計算例を第5.3図に示す。横軸は時間、縦軸は I_1 であり $\Delta t = 0.04$ [秒]， $W = 50\pi$ ， $K = 64$ ， $a = 1$ ， $b = -1$ とした。実際の誤差は2本の点線の間にある。図からこの誤差は t が小さいところで問題になると考えることができる。



第5.3図 積分誤差の計算例

5.3.2 台形誤差

積分区間 $[0, W]$ の定積分を台形公式で計算する場合の打ち切り誤差は、次式の程度であるとされている（マッカーラ，1972）。

$$I_2 = -W \Delta \omega^2 F''(\omega^*) / 12 \quad (5.15)$$

ただし $0 < \omega^* < W$ である。

第(5.9)式の積分では

$$F(\omega) = \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{j\omega t}}{(a-b) + j\omega} \right\} \quad (5.16)$$

であるから、第(5.16)式の ω に関する2階微分を求め、 t について整理すれば

$$\begin{aligned} F''(\omega) = & - \frac{\sin(\omega t + \theta_1)}{\sqrt{(a-b)^2 + \omega^2}} t^2 \\ & + \frac{2 \sin(\omega t + \theta_2)}{(a-b)^2 + \omega^2} t + \frac{2 \sin(\omega t + \theta_3)}{\sqrt{\{(a-b)^2 + \omega^2\}^3}} \end{aligned} \quad (5.17)$$

となり、 t の2次関数の形に表現できる。ここに、

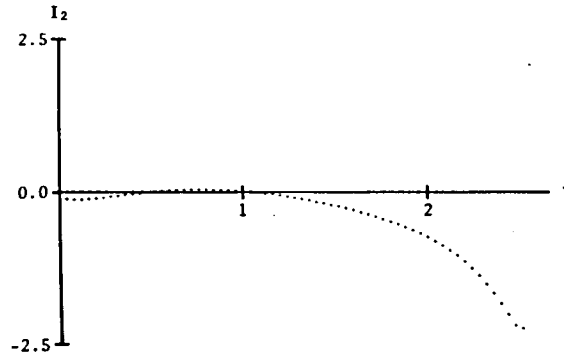
$$\begin{aligned} \theta_1 &= \tan^{-1} \left\{ \frac{(a-b)}{\omega} \right\} \\ \theta_2 &= \tan^{-1} \left\{ \frac{(a-b)^2 + \omega^2}{2(a-b)\omega} \right\} \\ \theta_3 &= \tan^{-1} \left[\frac{(a-b)\{3\omega^2 - (a-b)^2\}}{\omega\{\omega^2 - 3(a-b)^2\}} \right] \end{aligned}$$

である。

したがって台形誤差 I_2 は

$$\begin{aligned} I_2 = & \frac{W^3 \sin(\omega^* t + \theta_1)}{12K^2 \sqrt{(a-b)^2 + \omega^{*2}}} \left[\left\{ t - \frac{\sin(\omega^* t + \theta_2)}{\sqrt{(a-b)^2 + \omega^{*2}} \sin(\omega^* t + \theta_1)} \right\}^2 \right. \\ & \left. - \frac{\sin^2(\omega^* t + \theta_2) + 2 \sin(\omega^* t + \theta_1) \sin(\omega^* t + \theta_3)}{\{(a-b)^2 + \omega^{*2}\} \sin^2(\omega^* t + \theta_1)} \right] \end{aligned} \quad (5.18)$$

となる。第(5.18)式はパラメータが多く、また ω^* を特定することは困難なので厳密な議論はむづかしいが、 t が大きいところでは誤差 $|I_2|$ は大略 t^2 に比例することがわかる。



第 5.4 図 台形誤差の計算例

第 5.4 図に第(5.18)式を計算した 1 例を示す。ただし、 $b=-1$ ， $a=1$ ， $\Delta t=0.04$ および $K=64$ とし、 $F''(\omega^*)$ については

$$F''(\omega^*) = \frac{1}{K} \sum_{k=0}^{K-1} F''(\omega_k), \quad \omega_k = k \Delta \omega \quad (5.19)$$

を用いた。誤差は時間 t の増加と共に増大するとみることができる。

5.3.3 逆変換全体の誤差

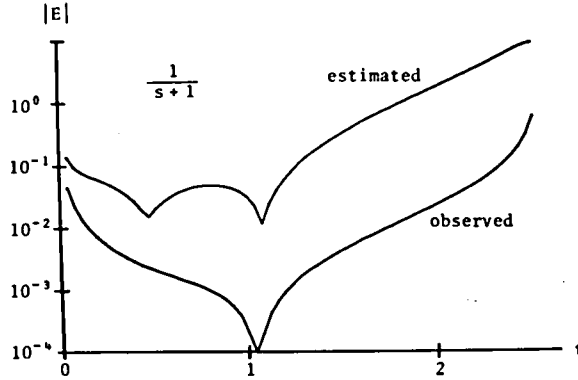
以上の議論から、逆変換定義式中の無限積分自体の計算誤差に関して、積分誤差、すなわち積分区間を W で限ったために生じる誤差は、 t が小さいところで考慮すればよく、逆に台形公式の打ち切り誤差は t が大きいところで影響が大きいと考えることができる。

第(5.7)式に対する逆変換全体の計算誤差は、まるめ誤差を無視した場合、

$$\begin{aligned} |E| &\simeq |E_1| + |E_2| \\ &= \frac{\exp(at)}{\pi} \{ |I_1| + |I_2| \} \end{aligned} \quad (5.20)$$

の程度となる。ここに I_1 と I_2 はそれぞれ第(5.14)式と第(5.18)式で与えられる。

1 例として、第(5.20)式と実際の誤差の比較を第 5.5 図に示す。図中、上の実線は第(5.



第 5.5 図 誤差評価と実誤差の比較

20)式, 下は第 5.2 節の計算法で生じる実誤差である。ただし, $b = -1$, $a = 1$, $\Delta t = 0.04$ および $K = 64$ とした。かなり過大ではあるが, 大略の傾向は説明していると考えられる。

5.4 積分路の影響

積分区間の打ち切りにより生じる逆変換の誤差 E_1 を再記すると次式となる。

$$|E_1| \simeq \frac{e^{at}(a-b+2W)}{\pi t \{(a-b)^2 + W^2\}} \quad (5.21)$$

一般には, $W \gg (a-b)$ と考えてよいから, $|E_1|$ は積分路 a に関して単調増加である。

台形公式による逆変換の誤差 E_2 は t の大きいところでその影響が大きくなるので, t が大きい場合だけを検討することにし, t^2 項とその振幅のみを考えれば, 誤差の傾向は近似的に次式のようになる。

$$|E_2| \simeq \frac{W^3 e^{at} t^2}{12\pi K^2 \sqrt{(a-b)^2 + \omega^{*2}}} \quad (5.22)$$

厳密に言えば式中の ω^* は他のパラメータによって変化するが, 簡単のため定数として扱い, 第 (5.22) 式を a について偏微分して増減を調べれば, $|E_2|$ は b の近傍を除けば a に関して大略単調増加であるとみなし得ることがわかる。

上述の議論をまとめると, a の選択に関して次のように言うことができる。すなわち, 少くとも t の大きい部分に関しては積分誤差および台形誤差のいずれについても $(a-b)$ を非常に

大きくすることは得策でない。

5.5 考 察

他のパラメータの影響も第(5.21)および第(5.22)両式から推量することができる。たとえば分割数 K は台形誤差にだけ $1/K^2$ で影響を与える。また積分区間の上限 W を大きくした場合、積分誤差は減少するが、台形誤差は逆に増加する。

さて、積分誤差は主に被積分関数の $\omega = W$ 付近での振幅の性質に依存し、台形誤差は被積分関数の周期成分、いわば搬送波の角周波数 t に大きく影響される。2次おくれ以上の系についても、被積分関数の振幅は一般に十分大きな W 以上では単調減少であり、またその ω に関する2次導関数も t が大きなところでは t^2 の影響が支配的になると考えられる。したがってこの場合にも1次おくれ系とほぼ同様の議論が成立すると予想することができる。さらにむだ時間 $\exp(-\tau s)$ がある場合も、 $t' = t - \tau$ として時間の原点を移動すれば、同一の議論が可能である。

5.6 ま と め

逆プラス変換の1数値計算法の誤差について論じた。この計算法は高速フーリエ変換を利用して、逆変換の定義式を直接数値積分するものである。本章では最も簡単な1次おぐれのインパルス応答について、この計算法で生じる計算誤差の1評価式を導いた。すなわち、計算機のまるめ誤差を無視すると、積分自体の誤差は積分区間の打ち切りによるものと、台形公式による数値積分の打ち切り誤差の2つに分けられ、前者は大略時刻 t に反比例し、後者は t^2 に比例することを明らかにした。また積分路については、系の時定数よりも少し大きめに選べば大過ないことを示した。

これらの結果を一般の高次系に対して直ちに適用することはできないが、少なくとも誤差についての定性的推論の根拠は与えることができる。すなわち、この逆ラプラス変換計算法の基本は角周波数 ω 領域での台形公式による数値積分であることから、時刻 t が増加するほど被積分関数の変動周期が短くなり、したがって誤差も増加すると理解することができる。

第6章 GMDH の収束に関する 2, 3 の性質

6.1 はじめに

近年、複雑なシステムの同定法として、GMDH (group method of data handling) が注目されている (Duffy, 1975 ; 井原, 1975 ; 池田三郎, 1975, 1976 ; 田村, 1976, 1978)。GMDH は Ivakhnenko によって 1968 年以来提唱されているパーセプトロン形の発見的自己組織化法で、比較的簡単な初等アルゴリズムを積み重ねることによって、入出力データに適合したモデルを構成する、いわゆる多層構造をもったシステム同定手法である (Ivakhnenko, 1968, 1970, 1971, 1972)。

GMDH では、従来から大規模かつ複雑で通常の理論的取扱いが困難とされるシステムに対する適用性が強調されるあまり、ともすれば進化論との類似性のみが指摘され、GMDH 自体の理論的な裏づけは必ずしも十分に議論されていない。また GMDH の問題点として、高次の層になるほど正規方程式の計算過程でいわゆるイルコンディション (ill condition) が生じやすくなることが知られている。

第3章においては、推定しようとするパラメータの出発値決定にこの GMDH の手法を用いたが、本章では、GMDH の性質の理論的解析の手がかりとして、中間変数の逐次生成という点に着目して単純化したアルゴリズムを設定し、これによって GMDH の逐次関数近似手法としての側面を明確にするとともに、中間変数の有する性質を検討する。そして、このアルゴリズムでは中間変数の収束が必ずしも保証されないことを示し、同時にイルコンディションが生じやすくなる理由を明らかにして、GMDH の適用にあたって注意する必要がある諸点を指摘する。

6.2 単純化した GMDH

GMDH の基本的構成要素として、次の 3 点をあげることができる。

- (1) 初等アルゴリズムによる中間変数の生成
- (2) チェッキング (checking) データによる中間変数の評価
- (3) 各層間での中間変数の閾值的選択

通常、GMDH ではチェックングデータに対する中間変数の 2 乗誤差が変数選択の規範として用いられる。しかし、この処理は結果の検定としてだけ作用し、各層での中間変数の生成に

は直接の影響を及ぼさない。また各層間での閾値の設定は、層を重ねるに従って組合せ可能な中間変数の数が極端に増加する事態を防ぐように作用するものである。従って、GMDH の中間変数生成に関する原理的な部分は、以下に述べるアルゴリズムで尽され则认为られる。ここに初等アルゴリズムとしては2次多項式を用い、入力の変数の数は層ごとに生成される中間変数の数の増加を避けるために3変数とする。またトレーニング (training) データ θ は3変数の空間 R^3 内のある閉領域 \mathcal{Q} 上のあらゆる点で与えられているものとし、GMDH を閉領域 \mathcal{Q} 上で2乗可積分なすべての関数のなす空間 $L^2(\mathcal{Q})$ 、 $\mathcal{Q} \subset R^3$ 内の関数 θ の逐次近似手法としての観点からとらえることにする。

6.2.1 単純化した GMDH のアルゴリズム

[アルゴリズム]

ステップ1: $i = 1, 2, 3$ に対し $\phi_{(i)}^0 = x_i$ とおく。ここに、 $(i) \triangleq i \pmod{3}$ 。

ステップ2: $k = 1$ とおく。

ステップ3: $i = 1, 2, 3$ に対し、次のノルムを最小にする6個の係数 $a_{i0}^k, a_{i1}^k, \dots, a_{i5}^k$ を求める。

$$\begin{aligned} \min \parallel \theta - [& a_{i0}^k + a_{i1}^k \phi_{(i)}^{k-1} + a_{i2}^k \phi_{(i+1)}^{k-1} + a_{i3}^k (\phi_{(i)}^{k-1})^2 \\ & + a_{i4}^k (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2 + a_{i5}^k \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}] \parallel \end{aligned}$$

この最小化には、最小2乗法を用いる。すなわち、 $a_{i0}^k, a_{i1}^k, \dots, a_{i5}^k$ は連立1次方程式

$$Q_i^k \mathbf{a}_i^k = \mathbf{p}_i^k$$

の解である。ここに

$$Q_i^k \triangleq \begin{bmatrix} \langle 1, 1 \rangle & , \dots, & \langle \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}, 1 \rangle \\ \langle 1, \phi_{(i)}^{k-1} \rangle & , \dots, & \\ \langle 1, \phi_{(i+1)}^{k-1} \rangle & , \dots, & \\ \langle 1, (\phi_{(i)}^{k-1})^2 \rangle & , \dots, & \\ \langle 1, (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2 \rangle & , \dots, & \\ \langle 1, \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1} \rangle & , \dots, & \langle \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}, \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1} \rangle \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a}_i^k \triangleq \begin{bmatrix} a_{i0}^k \\ a_{i1}^k \\ a_{i2}^k \\ a_{i3}^k \\ a_{i4}^k \\ a_{i5}^k \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{p}_i^k \triangleq \begin{bmatrix} \langle \theta, 1 \rangle \\ \langle \theta, \phi_{(i)}^{k-1} \rangle \\ \langle \theta, \phi_{(i+1)}^{k-1} \rangle \\ \langle \theta, (\phi_{(i)}^{k-1})^2 \rangle \\ \langle \theta, (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2 \rangle \\ \langle \theta, \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1} \rangle \end{bmatrix}$$

とする。

ステップ4: $i = 1, 2, 3$ に対し

$$\begin{aligned} \phi_{(i)}^k &= a_{i0}^k + a_{i1}^k \phi_{(i)}^{k-1} + a_{i2}^k \phi_{(i+1)}^{k-1} + a_{i3}^k (\phi_{(i)}^{k-1})^2 \\ &\quad + a_{i4}^k (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2 + a_{i5}^k \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1} \end{aligned}$$

とおく。

ステップ5: もしも $\|\theta - \phi_{(i)}^k\| = 0$ ならば終了。さもなければ $k = k+1$ としてステップ3へもどる。

ただし、上述のアルゴリズムにおいて x_i は入力変数、 $\phi_{(i)}^k$ は第 k 層における (i) 番目の中間変数、 θ はトレーニングデータを表わす。また

$$\theta = \theta(x_1, x_2, x_3) \in L^2(\mathcal{Q})$$

$$\|\theta\| \triangleq \langle \theta, \theta \rangle^{1/2}$$

$$\langle \theta, \phi \rangle \triangleq \iiint_{\mathcal{Q}} \theta \cdot \phi \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3$$

である。

このアルゴリズムはヒルベルト (Hilbert) 空間 $L^2(\mathcal{Q})$ 内の 6 次元部分空間 $[1, \phi_{(i)}^{k-1}, \phi_{(i+1)}^{k-1}, (\phi_{(i)}^{k-1})^2, (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2, \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}]$ 上への θ の直交射影 $\phi_{(i)}^k$ を求める手続きを部分空間の生成基底を順次入れ替えながら繰り返し行なうものである。

中間変数 $\phi_{(i)}^k$ を多項式としてみると、層番号 k が増加するとともにその次数は 2^k 次となって増加するが、 $\phi_{(i)}^k$ が関数空間の 1 要素であることにはかわりはない。結局、このアルゴリズムの目的はトレーニングデータ θ を含む 6 次元部分空間を生成することと考えることができる。

6.3 アルゴリズムの性質

〔補題 1〕 任意の k および i に関して

$$0 \leq \|\theta - \phi_{(i)}^k\| \leq \min\{\|\theta - \phi_{(i)}^{k-1}\|, \|\theta - \phi_{(i+1)}^{k-1}\|\}$$

が成立する (Ivakhnenko, 1972)。

証明： 第 $k-1$ 層の中間変数 $\phi_{(i)}^{k-1}$ と $\phi_{(i+1)}^{k-1}$ は部分空間 $[1, \phi_{(i)}^{k-1}, \phi_{(i+1)}^{k-1}, (\phi_{(i)}^{k-1})^2, (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2, \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}]$ の生成基底であるから、当然この部分空間に含まれている。したがって、この部分空間上への θ の直交射影である第 k 層の中間変数 $\phi_{(i)}^k$ についてこの補題の関係が成立することは明らかである。

〔補題 2〕 任意の k について次式が成立する。

$$\max_i \{\|\theta - \phi_{(i)}^{k+2}\|\} \leq \min_j \{\|\theta - \phi_{(j)}^k\|\}$$

ここに、 $i, j = 1, 2, 3$

証明： 入力変数は 3 変数であるから、補題 1 を 2 度用いると、任意の i に対して

$$\begin{aligned} \|\theta - \phi_{(i)}^{k+2}\| &\leq \min\{\|\theta - \phi_{(i)}^{k+1}\|, \|\theta - \phi_{(i+1)}^{k+1}\|\} \\ &\leq \min\{\|\theta - \phi_{(i)}^k\|, \|\theta - \phi_{(i+1)}^k\|, \|\theta - \phi_{(i+2)}^k\|\} \end{aligned}$$

が得られる。

〔補題 3〕 任意の k および i に対して

$$\|\phi_{(i)}^k - \phi_{(i+1)}^k\| \leq \|\theta - \phi_{(i)}^k\| + \|\theta - \phi_{(i+1)}^k\|$$

が成立する。

証明：ノルムの三角不等式から，上式の成立することは明らかである。

〔補題 4〕 $q_{\ell m}^k$ をグラム行列 Q_i^k の第 ℓ 行 m 列要素とする。もしも $\|\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \leq \varepsilon$ ならば，

$$\max_{\ell} |q_{\ell 2}^k - q_{\ell 3}^k| \leq \varepsilon M_0, \ell = 1, \dots, 6$$

が成立する。ここに， ε は正数であり，

$$M_0 = \max \{ \|\mathbf{1}\|, \|\phi_{(i)}^{k-1}\|, \|\phi_{(i+1)}^{k-1}\|, \|(\phi_{(i)}^{k-1})^2\|, \\ \|(\phi_{(i+1)}^{k-1})^2\|, \|\phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \}$$

である。

証明： 1 例として， $\ell = 2$ の場合を示す。コーシー・シュワルツ (Cauchy・Schwarz) の不等式を用いると，

$$\begin{aligned} |q_{22}^k - q_{23}^k| &= |\langle \phi_{(i)}^{k-1}, (\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}) \rangle| \\ &\leq \|\phi_{(i)}^{k-1}\| \cdot \|\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \\ &\leq \varepsilon \cdot \|\phi_{(i)}^{k-1}\| \end{aligned}$$

が得られる。他の行についても同様にして補題が示される。

〔補題 5〕 $q_{\ell m}^k$ を Q_i^k の第 ℓ 行 m 列要素とする。もしも $\|\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \leq \varepsilon$ ならば

$$\begin{aligned} \max_{\ell} |q_{\ell 4}^k - q_{\ell 5}^k| &\leq \varepsilon M_1 \\ \max_{\ell} |q_{\ell 5}^k - q_{\ell 6}^k| &\leq \varepsilon M_2 \\ \max_{\ell} |q_{\ell 5}^k - q_{\ell 4}^k| &\leq \varepsilon M_3 \end{aligned}$$

が成立する。ここに ε は正数であり，

$$\begin{aligned} M_1 &= \max \{ \|\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}\|, \|(\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i)}^{k-1}\|, \\ &\quad \|(\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i+1)}^{k-1}\|, \\ &\quad \|(\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) (\phi_{(i)}^{k-1})^2\|, \\ &\quad \|(\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2\|, \\ &\quad \|(\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \} \end{aligned}$$

$$M_2 = \max \{ \|\phi_{(i+1)}^{k-1}\|, \|\phi_{(i+1)}^{k-1} \phi_{(i)}^{k-1}\|, \|(\phi_{(i+1)}^{k-1})^2\|, \\ \|\phi_{(i+1)}^{k-1} (\phi_{(i)}^{k-1})^2\|, \|(\phi_{(i+1)}^{k-1})^3\|, \\ \|(\phi_{(i+1)}^{k-1})^2 \phi_{(i)}^{k-1}\| \}$$

$$M_3 = \max \{ \|\phi_{(i)}^{k-1}\|, \|(\phi_{(i)}^{k-1})^2\|, \|\phi_{(i)}^{k-1} \phi_{(i+1)}^{k-1}\|, \\ \|(\phi_{(i)}^{k-1})^3\|, \|\phi_{(i)}^{k-1} (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2\|, \\ \|(\phi_{(i)}^{k-1})^2 \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \}$$

である。

証明： 1例として、 $\ell = 2$ の場合は、

$$\begin{aligned} & |q_{24}^k - q_{25}^k| \\ &= | \langle (\phi_{(i)}^{k-1})^2, \phi_{(i)}^{k-1} \rangle - \langle (\phi_{(i+1)}^{k-1})^2, \phi_{(i)}^{k-1} \rangle | \\ &= | \langle (\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}), (\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i)}^{k-1} \rangle | \\ &\leq \| \phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1} \| \cdot \| (\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i)}^{k-1} \| \\ &\leq \varepsilon \cdot \| (\phi_{(i)}^{k-1} + \phi_{(i+1)}^{k-1}) \phi_{(i)}^{k-1} \| \end{aligned}$$

となる。他の行および列についても同様にして補題が成立する。

〔命題〕

上述の簡単化したGMDHのアルゴリズムでは、次の3つの場合のいずれかが生じる。

- (1) 有限な k で終了し、 $\|\theta - \phi_{(i)}^k\| = 0$ となる。
- (2) ステップ3の最小2乗法のグラム行列がいわゆるイルコンディションとなり、計算の続行が不能になる。
- (3) $\|\theta - \phi^\infty\| \neq 0$ なる ϕ^∞ に収束する。

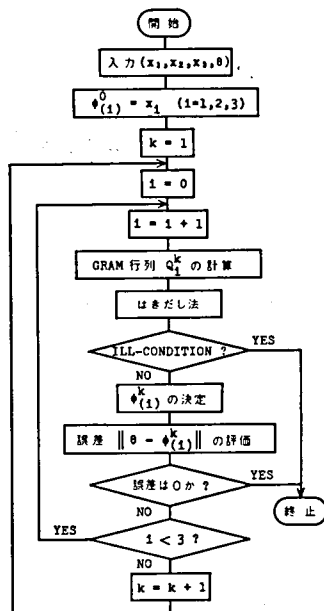
証明： 有限回で終了する場合は、ステップ5の終了条件から明らかである。

有限回では終了しない場合を考える。補題1より、 $\|\theta - \phi_{(i)}^k\|$ は単調非増大かつ下に有界であるから、このアルゴリズムは収束する。もしも各 k に対して、適当な i を選んで $\|\theta - \phi_{(i)}^k\| \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$)とできるならば、補題2から任意の i についても $\|\theta - \phi_{(i)}^k\| \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$)となり、補題3によって $\|\phi_{(i)}^{k-1} - \phi_{(i+1)}^{k-1}\| \rightarrow 0$ ($k \rightarrow \infty$)となる。したがってグラム行列 Q_i^k の第2, 3列および第4, 5, 6列はそれぞれ $k \rightarrow \infty$ において一致し、行列 Q_i^k

はイルコンディションになる。すなわち、中間変数がトレーニングデータに収束するならば数値的不安定が生じる。〔証明終〕

トレーニングデータが有限個である場合にも、内積の定義にある積分記号を総和記号で置き換えることによって同様の議論が可能である。

上述の議論を明らかにするため、簡単な数値例を次に示す。データにはトレーニングデータのみを用い、個数は10点とした。プログラムの流れ図を第6.1図に掲げる。プログラム中最小2乗法の部分に現われる連立方程式の解法には掃き出し法を用いた。計算機はYHP 2100Aミニコンピュータを使用し、プログラムはBASIC言語で作成した。したがって有効けた数は6けた程度と考えられる。



第6.1表 トレーニングデータ

No.	データ 1				データ 2			
	x_1	x_2	x_3	θ	x_1	x_2	x_3	θ
1	1	1	1	2	5	1	3	75
2	1	2	3	-1	2	4	2	130
3	1	3	21	-6	5	1	4	95
4	2	1	-3	7	2	3	3	110
5	2	3	1	1	2	1	4	38
6	3	1	9	14	2	4	3	162
7	3	2	12	13	4	4	4	388
8	-1	1	2	-2	4	1	2	44
9	-2	1	1	-1	2	2	2	50
10	1	-1	-5	2	3	2	2	75

第6.1図 簡単化したGMDHの流れ図

数値例に用いた入出力データを第6.1表に示す。表中データ1は多項式：

$$\theta = 1 + x_1 - x_2 + (x_1)^2 - (x_2)^2 + x_1 x_2$$

データ2は多項式：

$$\theta = x_1 + 2x_1(x_2)^2 + 4x_1x_2x_3$$

からそれぞれ適当に10点ずつ選んだものである。

データ 1 に対しては、第 1 層において中間変数

$$\phi_1^1 = 1 + x_1 - x_2 + (x_1)^2 - (x_2)^2 + x_1 x_2$$

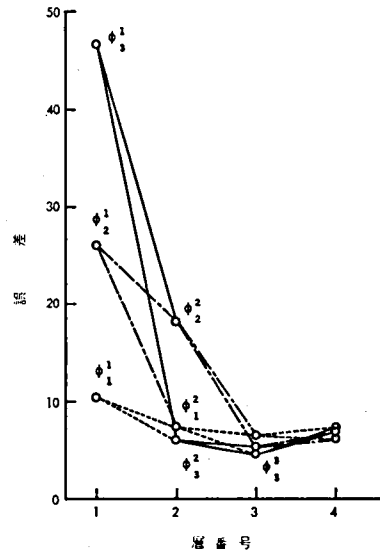
が得られ、アルゴリズムはただ 1 回で終了する。

これは命題の(1) の場合に相当する。

データ 2 に対して、各層ごとの 3 つの中間変数とトレーニングデータ θ との 2 乗誤差の様子を第 6.2 図に示す。図中の層間の結線は中間変数生成の因果関係を表わしている。第 3 層までは中間変数の単調非増大の性質（補題 1）が成立している。また第 1 層と第 3 層を比較すれば、補題 2 の性質の成立をも認めることができる。第 4 層に至って単調非増大の性質が失なわれるが、これはいわゆるイルコンディションによって計算誤差が生じたためである。試みに、第 3 層の中間変数 ϕ_3^3 を求める際のグラム行列 Q_3^3 を第 6.2 表に示す。この ϕ_3^3 は、ノルムの意味で互に近い 2 つの中間変数 ϕ_1^2 と ϕ_3^2 から生成されたものであり、明らかに第 2, 3 列および第 4, 5, 6 列（あるいはグラム行列は対称であるから、第 2, 3 行および第 4, 5, 6 行）はそれぞれ互いに非常に似かよったものになっていることがわかる。これは補題 3、補題 4 および補題 5 の性質を示している。したがって、データは命題の (2) の場合に相当すると考えることができる。

6.4 考 察

本章の第 6.2 節および第 6.3 節では、3 入力変数の場合について多項式 GMDH の中間変数生成機能だけを取り出した原理的なアルゴリズムを示し、このアルゴリズムは有限回で終了しなければ数値的不安定に陥るか、あるいはトレーニングデータと異なる関数に収束することを明らかにした。すなわち、トレーニングデータだけを用了 GMDH はデータ数が無限に多く



第 6.2 図 中間変数の誤差

第 6.2 表 行列 Q_3^3

10	1136.95	1142.01	227234	227630	227137
1136.94	227234	227137	6.7591E07	6.7531E07	6.7531E07
1142.01	227137	227630	6.7531E07	6.7587E07	6.7531E07
227234	6.7591E07	6.7531E07	2.3946E10	2.3880E10	2.3910E10
227630	6.7531E07	6.7587E07	2.3880E10	2.3840E10	2.3857E10
227137	6.7531E07	6.7531E07	2.3910E10	2.3857E10	2.3830E10

与えられている場合でも、関数近似の手法としては必ずしも満足すべきものではなく、特別な場合だけしか解を得ることはできない。

また、先に示した命題の(2)の場合の数値的不安定による計算誤差の蓄積、あるいは(3)の場合のようにトレーニングデータに収束しないことが考えられるために、いたずらに高次層の中間変数を求めても、それがトレーニングデータの満足すべき近似解になっている保証はない。

入力変数が4変数以上の場合や、チェックングデータによる中間変数の評価あるいは閾値的選択が加わった場合には、補題2を再検討する必要がある。4変数以上の場合、次層への中間変数の選択のやり方によっては、理論的には数値的不安定に陥らずにトレーニングデータへ収束する中間変数の系列が存在し得る。したがって、この場合には上述の命題は厳密には成立しない。しかし、適当な中間変数の選択基準が明らかでない以上、このような幸運を期待すべきではない。一般にノルムの意味でトレーニングデータに近い中間変数が選択された場合には、補題3、補題4および補題5によって基本的なGMDHのアルゴリズムは数値的不安定に陥ることは明らかである。したがって、多入力変数あるいはチェックングデータを用いる際にも、層を重ねるほどグラム行列がイルコンディションになる可能性が増大することを覚悟する必要がある。

数値的不安定に陥いる可能性を減少させる1つの方法として、中間変数の片方に常に入力変数を用いることが考えられる(竹原, 1974)。この場合にもトレーニングデータに対する中間変数の単調非増大性は保証される。そのうえトレーニングデータが単独の入力変数に近くない限りイルコンディションにならないことは明らかである。

6.5 ま と め

以上のように、多項式GMDHの基本的アルゴリズムは、3入力変数のような簡単な場合にも数値的不安定などの不つごうを生じる性質がある。GMDHの適用にあたっては、これらの性質に注意を払うとともにアルゴリズムの終了条件に何らかの外部的な基準、例えば、中間変数の次数の上限などを併用する必要がある。

第7章 結 論

本論文はコンパートメントアナリシスの観点から、RI アンギオカーディオグラムの情報処理に関する基礎的手法について述べたものである。全体は応用と理論の2つに分かれ、前半では関心領域の自動設定と心放射図の自動解析法を具体的に示し、後半ではパラメータ推定に際して出現する若干のシステム・制御工学的諸問題を理論的に取り扱った。

結論の詳細は各章の終りに記したが、全体的にまとめると次のようになる。

ヒトの血液循環系におけるRI 輸送過程のコンパートメントモデルを念頭において、心放射図に相当する計数率曲線を得るために、オートフルオロスコープで計測された 14×21 個の画素から成るRI 画像上で、右心入力部、右心部、肺部および左心部の関心領域を自動的に決定する手法を第2章で与えた。この手法はRI 輸送過程の時間的前後関係に着目して、各画素の計数率曲線の極大値到達時刻に関するヒストグラムの分割と、2次元的な連結図形の処理を組合せた比較的単純なものであるが、右心部と左心部をちょうど覆う心放射図用の関心領域を客観的に得る目的には十分なものである。第2章では、さらに心室部分を分離する1方法を示し、心室容積変化曲線の作成にも言及した。この曲線は心放射図から得られる心拍出量の推定値と組合せることによって、心臓のポンプ機能を表わし、診断上重要な資料となるものである。

第3章では本研究の主題である心放射図のパラメータ推定法を確立し、いくつかの処理例を挙げてこの手法が十分臨床的実用に耐えるものであることを明らかにした。さらにこの章で提案した周波数窓法は、通常の時間領域において残差2乗和を逐次的に最小化する最小2乗推定法と比較して、非常に計算量の少いパラメータ推定法であり、むだ時間等を含んだ複雑な線形システムのパラメータ推定に適用して有効なものである。またパラメータ推定の出発値の決定にGMDHを応用して信頼性の向上を計ることができた。

第4章では重み付き残差2乗和を評価関数とするパラメータ推定問題の幾何学的解釈を述べた。すなわち、データの作る空間に、モデルの張るパラメータ表示された部分空間と、評価関数から構成されるリーマン計量を導入することによって、パラメータ推定問題はリーマン幾何学の問題として取り扱えることを示した。その結果、データにかかわらずパラメータを一意的に決定できるための条件は、いわゆるオイラー・スカウテンの曲率テンソルが零となることであることを明らかにし、さらに曲率半径の概念を利用してパラメータ推定値の安定度を定義した。これによって従来あいまいであった評価関数の多峰性の問題を、比較の見通しよく論ずる

ことが可能となった。

第5章では、心放射図の数学モデルに現われるむだ時間を含んだ線形システム等のラプラス変換可能な系に対する数値計算法の1つであるFFTを用いた数値逆ラプラス変換法の計算誤差を、簡単な1次おくれ系を例にとりて論じた。そして、この計算法には計算機のまるめ誤差を除いて2種類の誤差、すなわち変換公式の積分区間上限の打ち切りによるものと数値積分法自身によるものがあることを示し、それらの誤差の性質を明らかにした。

最後に第6章では、GMDHの収束に関する理論的性質を論ずるために、模式的なGMDHのアルゴリズムを設定し、関数解析の手法を用いてこの収束が必ずしも保証されないことを明らかにして、GMDH適用上の留意点を指摘した。

このように本論文の前半はパラメータ推定の臨床医学分野への具体的応用例を与えたものである。今後はこのシステムを実地にシンチレーションカメラとミニコンピュータからなる核医学データ処理システムに組み込んで、より多くの臨床データを対象にして処理経験を重ね、手法の検証と改良を行いより信頼性のあるものにしていくことが必要である。

一方、後半の第4、5および6章は、すべて心放射図のパラメータ推定法開発過程における疑問点が契機となって生じた問題を扱ったものであり、これらの章で得られた結果は、一般にコンパートメントモデルのような生体システムのパラメータ推定問題に関する基本的な理解を深め、見通しをよくするものであると言える。

謝 辞

本研究は著者が京都大学大学院工学研究科在学中，桑原道義教授の御指導のもとに行なわれたものである。ここに同教授に対し心から御礼申し上げます。

また，終始有益な御助言を賜った英保茂助教授，森武宏助手，北川尚男技官，山本瑛子技官をはじめ京都大学工学部付属オートメーション研究施設関係者の皆様，さらに，医学的な問題に関する御指導・御教示を賜わるとともに臨床的データを御提供いただいた京都大学医学部付属病院放射線核医学科鳥塚莞爾教授，石井靖助教授，米倉義晴医師，同第3内科平川顕名助教授ならびに滋賀県立成人病センター本原征一郎博士に謹しんで感謝の意を表します。

参 考 文 献

- Bard, Y. (1974). *Nonlinear parameter estimation*. Academic Press. pp. 170–217.
- Bellman, R. and K.J. Aström (1970). On structural identifiability. *Mathematical Biosciences*, 7, 329.
- Birta, L.G. (1976). Some investigations in function minimization. *IEEE Trans. Systems, Man and Cybernetics*, SMC-6, 186.
- Cobelli, C. and G. Romanin Jacur (1976a). On the structural identifiability of biological compartmental systems in a general input output configuration. *Mathematical Biosciences*, 30, 139.
- Cobelli, C. and others (1976b). Controllability, observability and structural identifiability of multi-input multi-output biological compartmental systems. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, BME-23, 93.
- Cobelli, C. and others (1978). Identifiability of time variant compartmental models of biological processes. *Preprintes of IFAC 7th World Congress*, 509.
- Duffy, J. J. and others (1975). A learning identification algorithm and its application to an environmental system. *IEEE Trans. Systems, Man and Cybernetics*, SMC-5, 226.
- Fletcher, R. and M.J.D. Powell (1963). A rapidly convergent descent method for minimization. *Comput. J.*, 6, 163.
- Hachimura, K. (1979). *Image processing of the radioisotope angiocardiograms*. Doctor thesis, Kyoto Univ.
- 平川顕名, 他 (1969). 心放射図による心機能の動態解析, 総合臨床, 18, 1875.
- Hirakawa, A. and others (1977). Decreased early diastolic dV/dt in ischemic heart disease observed by ECG-gated radiocardiography. *Japanese circulation J.*, 41, 501.
- Ichikawa, S. (1975). Numerical inversion of Laplace transform. In *Studies on operational calculus and its numerical treatments for matrices of functions and their applications to analysis of surges on transmission systems*. Doctor thesis, Kyoto Univ. Chap. 6, pp. 65–90.
- 井原二郎 (1975). 改良形 GMDH — 動的世界人口モデルの場合 —. システムと制御, 19, 201.
- 池田峰夫 (1975). 現代ベクトル解析とその応用. コロナ社.

- 池田三郎, 榎木義一 (1975). GMDH と複雑な系の同定・予測. 計測と制御, 14, 185.
- 池田三郎, 他 (1976). 逐次 GMDH アルゴリズムとその河川流量予測への応用. 計測自動制御学会論文集, 12, 209.
- Ivakhnenko, A. G. and others (1968). The group method of data handling in pattern recognition and decision problems. *Soviet Automatic Control*, 13, 331.
- Ivakhnenko, A. G. and others (1969). Group handling of data in identification of the static characteristic of a multi-extremal plant. *Soviet Automatic Control*, 14, 30.
- Ivakhnenko, A. G. (1970). Heuristic self-organization in problems of engineering cybernetics. *Automatica*, 6, 207.
- Ivakhnenko, A. G. (1971). Polynomial theory of complex systems. *IEEE Trans. Systems, Man and Cybernetics*, SMC-1, 364.
- Ivakhnenko, A. G. and P. I. Kovalchuk (1972). Unique construction of regression curve using a small number of points. *Soviet Automatic Control*, 17, 26.
- Jacquez, J. A. (1972). *Compartmental analysis in biology and medicine*. Elsevier.
- コワリック, J., 他 (1968). 非線形最適化問題. 培風館. pp. 154-160.
- 久保田健治, 北森俊行 (1974). 多次元多峰性未知関数の最大値探索法. 計測自動制御学会論文集, 10, 707.
- Kuester, J. L. and J. H. Mize (1973). *Optimization techniques with FORTRAN*. McGraw-Hill. pp. 355-366.
- 桑原道義, 他 (1967). ラジオカーディオグラムを模擬するアナログ計算機による心機能の分析. アナログ技術研究会資料, 7, 1.
- Kuwahara, M. and others (1967). Radiocardiogram analysis by analog computer simulation. *Digest of the 7th ICMBE*, 179.
- Kuwahara, M. and others (1972). Analysis of radiocardiogram by analog computer simulation. *International Journal of Biomedical Engineering*, 1, 13.
- 桑原道義, 他 (1973). 心放射図と心脳放射図のシミュレーションによる大動脈弁逆流率と脳血流の決定. 医用電子と生体工学, 11, 27.
- マッカーラ, T. R. (1972). 数値計算法概論. サイエンス社. pp. 232-264.
- MacIntyre, W. J. and others (1958). The determination of cardiac output by the dilution method without orterial sampling 1. *Circulation*, 18, 1138.
- 前田肇, 児玉慎三, 梶谷文彦 (1976). コンパートメントアナリシスのシステム理論的考察 — マミラリーシステムの伝達関数について. 電子通信学会論文誌, J-59-D, 347.

- Maeda, H., S. Kodama and Y. Ohta (1978). Asymptotic behavior of nonlinear compartmental systems: nonoscillation and stability. *IEEE trans. Circuits and Systems*, CAS-25, 372.
- 松田幸次郎編 (1969). 生理学大系Ⅲ. 医学書院. p. 86.
- 湊小太郎, 桑原道義 (1974). 非線形最適化手法のテンソル記法による考察. 第17回自動制御連合講演会前刷, 261.
- 湊小太郎, 桑原道義 (1976a). GMDH の収束に関する二, 三の性質. 電気学会論文誌C, 96, 56.
- Minato, K. and M. Kuwahara (1976b). Some convergent properties of GMDH. *Electrical Engineering in Japan*, 96, 106.
- 湊小太郎, 桑原道義 (1976c). パラメータ可同定性の一考察. 第19回自動制御連合講演会前刷, 43.
- 湊小太郎, 桑原道義, 米倉義晴, 石井靖, 平川頭名 (1978a). ミニコンピュータによる心放射図の自動解析. 医用電子と生体工学, 16, 15.
- Minato, K., M. Kuwahara, Y. Yonekura and A. Hirakawa (1978b). Parameter estimation of radiocardiogram using a minicomputer. *Preprints of IFAC 7th World Congress*, 533.
- 湊小太郎, 他 (1978c). 肺希釈曲線からの心内左右短絡率の推定. 第17回日本ME学会大会論文集, 363.
- 湊小太郎, 桑原道義 (1978d). 数値逆ラプラス変換の誤差解析. 第21回自動制御連合講演会前刷, 5.
- Minato, K., M. Kuwahara, Y. Yonekura and A. Hirakawa (1979). Parameter estimation of radiocardiogram using a minicomputer. *Automatica*, 15, 521.
- 宮川洋, 他 (1975). デジタル信号処理. 電子通信学会. pp. 28 - 36.
- Motohara, S. and others (1974). Quantitative estimation of aortic regurgitation by analog computer analysis of radiocardiogram. *Japanese Circulation J.*, 38, 169.
- 長沢亨, 他 (1977). クラスタ分析による心 RI アンギオの解析. 第16回日本ME学会大会論文集, 336.
- 長沢亨, 他 (1978). 心 RI アンギオグラフィのクラスタ分析と心機能パラメータの算出. 第17回日本ME学会大会論文集, 367.
- Preston, Jr. K. and M. Onoe (Ed.) (1976). *Digital processing of biomedical images*. Univ. of Tokyo Press.
- ローゼルフェルド, A. (1969). 電子計算機による画像処理. 共立出版. pp. 146 -

- Saito, M. and others (1973). Determination of intracardiac shunts in patients with congenital heart disease by means of analog simulation of radiocardiogram. *Japanese Circulation J.*, 37, 1.
- Saito, M. and others (1974). Circulating blood volume and its distribution in the heart, lung and body in normal subjects and cardiac patients determined by analog simulation of radiocardiogram. *Japanese Circulation J.*, 38, 305.
- Sheppard, C. W. (1962). *Basic principles of the tracer method*. John Wiley & Son's, Inc.
- Silverberg, M. (1970). Efficient time-domain solutions using nodal state variables. *IEEE Trans. Circuit Theory*, CT-17, 82.
- Sokolnikoff, I. S. (1951). *Tensor analysis*. John Wiley & Son's, Inc.
- 立花俊一 (1967). リーマン幾何学. 朝倉書店.
- 竹原寿男, 小野敏郎, 中島条男 (1974). GMDHによる非線形系の同定. 第17回自動制御連合講演会前刷, 139.
- 田村担之, 青谷年永 (1976). 大気汚染伝播マトリクスと GMDHによる広域大気汚染濃度パターンの同定. 計測自動制御学会論文集, 12, 121.
- 田村担之, 近藤正 (1978). モデル選択の評価規準に予測平方和を用いる改良形 GMDH. 計測自動制御学会論文集, 14, 519.
- Törn, A. A. (1977). Cluster analysis using seed points and density-determined hyperspheres as an aid to global optimization. *IEEE Trans. Systems, Man and Cybernetics*, SMC-7, 610.
- 矢野健太郎 (1971). リーマン幾何学入門. 森北出版.